メ シ ア

量子力学

3

小出昭一郎
田 村 二 郎 訳

東京図書株式会社

Albert Messiah

MÉCANIQUE QUANTIQUE

《Dunod》 Paris 1959

訳者まえがき

ここにようやく「メシア量子力学」全巻の訳出を終え，最後の第3巻を世に送り出すことになった．第1，2巻の読者カードを通じて寄せられた読者の御意見の大部分は，早く全巻を完結せよという要求であった．われわれとしては，この声に励まされて鋭意努力をつづけてきたつもりであるが，いまここに責任を果たすことができたのは非常な喜びである．

この第3巻は近似法と相対論的量子力学から成っている．近似法は量子力学を実際に使う場合には不可欠の武器である．本書では，豊富な例を用い，新しい方法を存分に取り入れて，ずいぶん詳しい議論を展開している．ここは，量子力学の有用性を最もよく示している部分であるということができよう．これに対し，相対論的量子力学は未完成の分野であって，多くの理論的困難を含んでいる．だがそれだけいっそう興味をひく分野でもあって，ここには今度の研究者にとって魅力のある素材が特に多く見いだされるであろう．

本書を翻訳してみて，数学者である訳者の一人が感じた印象はつぎのようなものであった．

応用の方面に関心をもつ研究者に対してこの“量子力学”が与える印象は，数学書の場合と大きな違いはないかもしれない．事実，ここに用いられている数学はかなり水準の高いものである．もしもこのような内容について“数学的に完全な”説明を与えようとすれば，膨大な紙数を要するに違いない．数学的手段を拒むことなく，これに溺れることもなく，あるときは簡潔にあるときは詳細に説き進む著者の手腕に対して敬意を表したい．しかしながら，この書物は本質においてあくまでも物理学の解説書である．数学的思考にはなじんでいても物理学の専門家でない立場でみると，各所で詳しく解説される物理的概念と数学的概念の対応や，理論的結果と実験データの比較から実に新鮮な印象を受ける．おそらく多くの読者も同じ印象をもたれることであろう．

物理学の基本的な方程式を理論的に解明することは，つねに新しい数学のテーマであった．シュレーディンガー方程式の研究も，その近似解法の開発とともに，今後の発展が期待されよう．未完成の相対論的量子論は，その困難のゆえにいっそう魅力的といえる分野であるが，ここでわれわれに現在欠けているものの一つは，数学的な枠組であろう．新し

い枠組は，伝統的なヒルベルト空間を一般化することによって，現在の関数解析の手段を用いてつくりうるものであろうか．あるいはまた，われわれのもっている解析学全体の基本概念，すなわち“連続的な実数の体系”まで再検討を迫られるのであろうか．

いずれにせよ，物理学と数学との有機的な結びつきは今後もなお強化されるであろう．物理学における実証性の要求と，数学における論理性の要求は，その本質において両者を隔てるものではなく，むしろ両者を結びつけるものであると思われる．現代の教育体系におけるこれら二つの学問の不自然な分離にもかかわらず，両者が緊密な関連を保ちつつ発展してきたことは，本書の内容がこれを雄弁に物語っている．今世紀における最大の数学者の一人，ヘルマン・ワイルは述べている．

“現実を支配する自然法則に対して，われわれが完全に透徹した理解をもつとき，それは最も透明な単純さと，最も円満な調和をもって表わされる．単純さと調和に対するこの感覚は，今日理論物理学において欠くことのできないものであるが，これを発達させることこそ数学教育の主要問題であると思う．”(H. Weyl: Raum Zeit Materie)

量子力学の応用を志す読者は特に近似法の部分から得るところが多いであろう．また，相対論的量子論（場の量子論）の完成に魅力をもつ読者は本巻の後半の部分をその研究の出発点とすることができるであろう．この訳書がそのような方々のお役に立つことをわれわれは念願している．

今回も，松本重彰氏をはじめとする東京図書の方々や印刷所の方々のなみなみならぬ御協力を頂いたおかげで，これだけ短時日でこれだけの本をつくることができた．記して感謝の意を表したい．

1972年10月

田　村　二　郎

小　出　昭一郎

総　目　次

第3巻目次

第4部　近　似　法

第16章　定常状態の摂動論

第17章　時間を含むシュレーディンガー方程式の近似解

第18章　変分法とそれに関連した問題

第19章　衝突の理論

第5部　相対論的量子力学入門

第20章　ディラック方程式

第21章 電磁場の量子化. 輻射の理論

あなたに差し上げたお料理がうまくできておりませんでも，わたくしのコックのせいではなく，化学のせいでございます．化学はまだ幼年時代にございますからね．

《鳥料理レーヌ・ペドーク亭》

第4部

近　似　法

前頁に引用されている《鳥料理レーヌ・ペドーク亭》(*La Rôtisserie de la reine Pédauque*) はアナトール・フランス (1844〜1924) の1893年の作品．

第16章　定常状態の摂動論

§1.　第4部の一般的序説

量子力学において厳密に解ける問題はいくつかあるけれども，それらはごく特殊な，ごく簡単な系に関する問題だけである．実際上，近似法を使わないではどんな物理系を調べることもできない．物理学者の手腕とはまさに，いろいろな効果の相対的な重要さについて正確な観念をつくり上げ，それぞれの場合に応じて適切な近似の手段をとることである．的確に言えば問題の数だけ近似法があるわけで，ここでそれらを全部説明することは思いもよらない．この本では，十分な一般性をもつために系統的に解説する価値のある方法を述べる．そのうちのいくつかについては，すでに論じたことがある．特に，古典近似法と WKB 法 (第6章)，また散乱の問題における位相のずれの方法 (第10章) がそれである．その他の方法はこの第4部の主題になっている．

数学的には，量子系の研究は時間的変化の演算子 $U(t,t_0)$ を決めること，あるいは少なくとも，この演算子を特徴づけるいくつかの性質を求めることである．系のハミルトニアン H が時間を含まないとき，これは H の固有値問題を解くことに帰着する．実際，この場合には

$$U(t,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}$$

となることがわかっているから，U の性質は H の性質に直接結びついている．H が時間を含むとき，事はもっと複雑である．しかしながら，(この場合は時間の関数である) H の固有解と固有値の性質が，U の性質を調べるときに問題となることは明らかである．

全体的に，衝突の問題には連続スペクトルをもつ固有状態が入ってくるため，束縛状態に関する問題よりむずかしい．衝突の問題にはこの第4部の最後の章 (第19章) で立ち入ることにする．その他の三章 (第16—18章) は本質的に束縛状態の研究に関係している．しかし，そこで解説する方法を，場合によっては非束縛状態の研究に拡張することもできる．束縛状態の問題はそれ自体つぎの二つの種類に分けられる．一つは，定常状態の決定，もっと正確に言えば，H の固有値問題を解くことであり，もう一つは，ある定常状態から他の定常状態への遷移を計算することである．H の固有値問題を近似的に解くためには，ふつう三種の方法が用いられる．第一は古典近似，すなわち大きな量子数と小さな波長による近似に基づくものである．これは WKB 法 (第6章) である．第二は，H

に近い演算子 H_0 の固有値問題に対する厳密な解から出発して，固有値と固有関数を差 $H-H_0$ のべき級数展開の形で表わす方法である．これは定常摂動法である．第三は変分による方法であり，前の二つの方法はうまくゆかないけれども，求める固有解の挙動が直観的によく理解できるときに用いられる．定常摂動法は本章で取り扱い，変分による方法は第18章で取り扱う．第17章は遷移の計算，およびもっと一般に，系のハミルトニアンが時間の経過とともに変形するとき，束縛状態の変化の法則を調べる主な方法に当てられる．

I．縮退のない準位の摂動

§2.　摂動のべき級数展開

ハミルトニアン H は《摂動のないハミルトニアン》H_0 と摂動項との和であると仮定する．摂動項を λV の形に書くとつごうがよい．V は H_0 と同じく時刻に無関係なエルミート演算子で，λ は実のパラメータである．すなわち

$$H = H_0 + \lambda V. \tag{1}$$

H_0 の固有値問題は解けているとする．H_0 の固有値の列を

$$E_1^0,\ E_2^0,\ \cdots,\ E_i^0,\ \cdots$$

とする．各 E_i^0 に基底固有ベクトルの系が対応するが，これらのベクトルを $|E_i^0\alpha\rangle$ で表わす．対応する固有値が縮退しているときには，量子数 α によってこれらのベクトルを互いに区別する．すなわち

$$H_0|E_i^0\alpha\rangle = E_i^0|E_i^0\alpha\rangle. \tag{2}$$

H のスペクトルは λ の関数として連続的に変化し，$\lambda=0$ のときには H_0 のスペクトルと一致する．H_0 の一つの固有値を E_a^0 とする．$\lambda\to 0$ のとき E_a^0 に近づくような H の（一つまたはいくつかの）固有値を計算し，対応する H の固有状態を決定するのがわれわれの目的である．書き方を簡単にするため，H_0 のスペクトルは完全にとびとびであると仮定してある．実は，H_0 のスペクトルの一部が連続であっても，固有値 E_a^0 がとびとびのスペクトルに属する限り，これから述べることはすべて成り立つ．

固有値 E_a^0 が縮退していないとき，この方法は特に簡単である．本節を通じて，このような特殊の場合だけを取り扱う．

$\lambda\to 0$ のとき E_a に近づく H の固有値を E とする．これもまた単純な固有値である．対応する固有ベクトル $|\psi\rangle$ は定数を除いて定まるから，任意の規約によってこれを固定することができる．われわれはつぎのように $|\psi\rangle$ を定義する：

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{3}$$

$$\langle 0|\psi\rangle = \langle 0|0\rangle = 1. \tag{4}$$

ただし $|E_a^0\rangle = |0\rangle$ と置いてある．この定義により，$\lambda \to 0$ としたとき $|\psi\rangle$ は $|0\rangle$ に近づく．

摂動 λV が十分小さいとき，E と $|\psi\rangle$ は λ のべき級数展開によって表わされ，これらの級数は速く収束すると考えるのが妥当である．すなわち

$$E = E_a^0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \cdots + \lambda^n\varepsilon_n + \cdots \tag{5}$$

$$|\psi\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \cdots + \lambda^n|n\rangle + \cdots. \tag{6}$$

この展開の初めの数項だけをとれば，E と $|\psi\rangle$ に対する近似式が得られる．収束が速ければ速いほどこの近似は良くなる．

摂動法は展開 (5) と (6) の係数列を決めることである．そのために，等式 (3) の両辺の H, E, $|\psi\rangle$ のところへ，それらの式 (1)，(5)，(6) をそれぞれ代入する．そうすれば，λ に関する二つのべき級数展開のあいだの等式の形になる．この等式が成り立つためには，λ の各累乗の係数が互いに等しくなければならない．こうしてつぎつぎに，

$$(H_0 - E_a^0)|0\rangle = 0 \tag{7^0}$$

$$(H_0 - E_a^0)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \tag{7^1}$$

$$(H_0 - E_a^0)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0 \tag{7^2}$$

………

$$(H_0 - E_a^0)|n\rangle + (V - \varepsilon_1)|n-1\rangle \cdots - \varepsilon_n|0\rangle = 0 \tag{7^n}$$

………

が得られる．条件 (4) も同じように

$$\langle 0|1\rangle = \langle 0|2\rangle = \cdots = \langle 0|n\rangle = \cdots = 0 \tag{8}$$

と書き表わされる．

(7^0) によって第0次の固有エネルギーと固有ベクトルが定まる．条件 (8) を考慮に入れると，(7^1) によって，これら二つの量の第1次の補正が定まり，(7^2) によって第2次の補正，…，(7^n) によって第 n 次の補正が定まる．

実際，(7^n) により，ε_n と $|n\rangle$ がそれより低次のものの関数として定められることを示そう．そのためには，H_0 の基底ベクトル上への射影を求める．$|0\rangle$ 上への射影により，関係 (8) を考えに入れて，

$$\varepsilon_n = \langle 0|V|n-1\rangle \tag{9}$$

が得られる．他の基底ベクトルへの射影により，そのベクトルの方向に対する $|n\rangle$ の成分

$$\langle E^0\alpha|n\rangle = \frac{1}{E_a^0-E^0}[\langle E^0\alpha|(V-\varepsilon_1)|n-1\rangle - \varepsilon_2\langle E^0\alpha|n-2\rangle - \cdots - \varepsilon_{n-1}\langle E^0\alpha|1\rangle]$$
$$(E_a^0 \neq E^0)$$

が定められる．$\langle 0|n\rangle = 0$ であるから，これによって $|n\rangle$ は完全に決められる．便宜上

$$Q_0 \equiv 1-|0\rangle\langle 0| = \sum_{E^0\neq E_a^0}\sum_\alpha |E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|$$

および

$$\frac{Q_0}{a} \equiv Q_0\frac{1}{E_a^0-H_0}Q_0 = \sum_{E^0\neq E_a^0}\frac{\sum_\alpha|E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|}{E_a^0-E^0} \tag{10}$$

と置く (*)．この記号を使えば

$$|n\rangle = \frac{Q_0}{a}[(V-\varepsilon_1)|n-1\rangle - \varepsilon_2|n-2\rangle - \cdots - \varepsilon_{n-1}|1\rangle] \tag{11}$$

と書くことができる．(9) および (11) は (7^n) と同値であるから，さきに述べた性質は証明される．

§3. 第1次の摂動

第1次の補正は式 (7^1) から導かれる．それを得るには，$n=1$ という特殊な場合について (9) と (11) を書き下せばよい．

(9) によりエネルギー準位に対する第1次の補正

$$\boxed{\varepsilon_1 = \langle 0|V|0\rangle} \tag{12}$$

が得られ，これから E の第1近似式

$$E = \langle 0|H|0\rangle + O(\lambda^2) \tag{13}$$

が導き出される．これは摂動のないハミルトニアン H_0 の固有ベクトルに関して，ハミルトニアン H の平均値を計算したものになっている．

(11) から固有ベクトルに対する第1次の補正

(*) [訳注]

$$A \equiv \sum_{E^0\neq E_a^0}\frac{\sum_\alpha|E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|}{E_a^0-E^0} + c|E_a^0\rangle\langle E_a^0| \qquad (c \text{ は任意の定数})$$

と置けば，$(E_a^0-H_0)A = Q_0$．したがって

$$A = \frac{1}{E_a^0-H_0}Q_0$$

と書くことにする．Q_0A が (10) の右辺に等しいことは明らかである．Q_0/a はこれを表わす略記号である．

$$|1\rangle = \frac{Q_0}{a}(V-\varepsilon_1)|0\rangle$$

が得られるが，$Q_0|0\rangle = 0$ であるから，この式は

$$|1\rangle = \frac{Q_0}{a}V|0\rangle \tag{14}$$

となる．それゆえ，ベクトル $|\psi\rangle$ の第1近似式は

$$|\psi\rangle = \left(1+\lambda\frac{Q_0}{a}V\right)|0\rangle + O(\lambda^2) \tag{15}$$

によって与えられ，そのノルムは

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \langle 0|0\rangle + \langle\psi|Q_0|\psi\rangle \\ &\simeq \langle 0|0\rangle + \lambda^2\langle 1|1\rangle = 1+\lambda^2\left\langle 0\left|V\frac{Q_0}{a^2}V\right|0\right\rangle \quad (*) \\ &= 1+O(\lambda^2).\end{aligned}$$

(14) によれば，ベクトル $|0\rangle$ に対する第1次補正 $\lambda|1\rangle$ の $|E^0\alpha\rangle$ 方向の成分，すなわち摂動のないハミルトニアンの基底ベクトル方向の成分は，つぎの式によって与えられる：

$$\lambda\langle E^0\alpha|1\rangle = \frac{\langle E^0\alpha|(\lambda V)|0\rangle}{E_a^0 - E^0} \qquad (E^0 \neq E_a^0). \tag{16}$$

したがって，$|E^0\alpha\rangle$ 方向の成分は，$|E^0\alpha\rangle$ に $|0\rangle$ を結びつける摂動の行列要素と，摂動のないこれら二つの固有状態のあいだのエネルギーの差との比である．この比の小ささによって，摂動の級数の収束の速さに対する一つの尺度が与えられる．

§4．ヘリウム原子の基底状態

第一の例として [1]，ヘリウム原子およびもっと一般に，$(Z-2)$ 重にイオン化された原子の基底状態のエネルギーを評価するために摂動法を使ってみよう．このような原子は，電荷 Ze をもつ重い核と二つの電子からできている．核は限りなく重いと仮定すれば，ハミルトニアン H はポテンシャル

$$-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

(*) ［訳注］ この式に現われる演算子 Q_0/a^2 は (10) により，

$$\frac{Q_0}{a^2} = Q_0\frac{1}{(E_a^0-H_0)^2}Q_0 = \sum_{E^0\neq E_a^0}\frac{\sum_{\alpha}|E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|}{(E_a^0-E^0)^2}.$$

[1] この例は L. PAULING と E. B. WILSON，前掲書（本書第14章〔第2巻197頁〕の注 [13]）から引用した．

のなかの2電子のハミルトニアンである．$\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ はそれぞれ〔核に対する〕第1および第2の電子の位置ベクトル，$r_{12}=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$ はそれらの相互距離である．

相互斥力の項 e^2/r_{12} を無視すれば，この系のハミルトニアンはクーロン場 $-Ze^2/r$ 内の独立な2粒子のハミルトニアンになり，このハミルトニアンについては固有値問題を厳密に解くことができる．われわれはこのハミルトニアンを《摂動のないハミルトニアン》としてとり，相互斥力 e^2/r_{12} を摂動として取り扱う．H_0 の基底状態は，二つの電子が両方とも 1s 状態にあるときに得られる．

水素原子の基底状態における結合エネルギーを E_H で表わす．H_0 の基底状態がもつ固有エネルギーは，各電子のエネルギーの和，すなわち

$$E_a^0=-2Z^2E_H$$

である．対応する固有関数は各電子の固有関数の積，すなわち（付録B，§3を参照）

$$\Phi_a(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\mathrm{e}^{-(r_1+r_2)/a}/\pi a^3$$

であり，

$$a=a_0/Z=\hbar^2/Zme^2(\simeq Z^{-1}\times 0.53\times 10^{-8}\,\mathrm{cm})$$

である．

摂動 $V=e^2/r_{12}$ の影響は，式(12)$(\lambda=1)$ によって第1近似まで与えられる．すなわち

$$\varepsilon_1=\int\Phi_a V\Phi_a\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2=\frac{e^2}{\pi^2a^6}\int\frac{\mathrm{e}^{-2(r_1+r_2)/a}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2. \tag{17}$$

これは，

$$\rho_1(r)=\rho_2(r)=\mathrm{e}^{-2r/a}/\pi a^3 \tag{18}$$

と置くとき，分布の密度がそれぞれ $-e\rho_1(r_1)$ と $-e\rho_2(r_2)$ であるような二つの球対称に分布した電荷のあいだの静電エネルギーである．積分

$$I=\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\,\frac{\rho_1(r_1)\rho_2(r_2)}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

を計算するために，付録Bの展開式(99)を用いる．角についての積分をすませると(*)，

$$\begin{aligned}I&=16\pi^2\int_0^\infty\mathrm{d}r_1\int_0^\infty\mathrm{d}r_2\,\rho_1(r_1)\rho_2(r_2)r_1^2r_2^2/r_>\\&=16\pi^2\int_0^\infty\rho_1(r_1)r_1\mathrm{d}r_1\left\{\int_0^{r_1}\rho_2(r_2)r_2^2\mathrm{d}r_2+r_1\int_{r_1}^\infty\rho_2(r_2)r_2\mathrm{d}r_2\right\}\end{aligned} \tag{19}$$

となり，$\varepsilon_1=e^2I$ である．積分 I は分布 ρ_1 と ρ_2 の式(18)を使って計算される．計算の結果は

(*)［訳注］
$$\int_0^\pi P_l(\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta=\begin{cases}2 & (l=0\ のとき)\\ 0 & (l>0\ のとき).\end{cases}$$

$$\varepsilon_1 = \frac{5}{4} Z E_H. \tag{20}$$

電子の相互斥力のエネルギーが核の引力のエネルギーに対して小さいほど，この近似の（相対）誤差は小さくなる．それゆえ，Z が大きくなるほど近似は良くなる．このことは16•1表によって確かめられる．この表では，He，Li^+，Be^{++} の基底状態における結合エネルギーについて，摂動の理論によって与えられる値に実験結果を対照させてある．実際には，摂動の展開式は理論的に予想されるよりも速く収束し，結合エネルギーを第1近似まで計算した結果は，ヘリウム（$Z=2$）の場合でさえ実験値とかなりよく合っている．

16•1表　He，Li^+，Be^{++} 原子の基底状態における結合エネルギー．
エネルギーはすべて電子ボルトで表わされている．第2，3，4列に与えられているのは，それぞれ摂動のないエネルギー，第1次摂動，これら二つの量の和すなわち摂動の計算による基底準位エネルギーの第1近似である．第5列に与えられているのは，第18章，§6の変分による計算の結果である．第6列に与えられているのは，基底準位エネルギーの実験値である（L.PAULING と E.B.WILSON，前掲書による）．

	1	2	3	4	5	6
	Z	E_a^0	ε_1	$E_{\text{pert.}} = E_a^0 + \varepsilon_1$	$E_{\text{var.}}$	$E_{\text{exp.}}$
He	2	−108	34	− 74	− 76.6	− 78.6
Li^+	3	−243.5	50.5	−193	−195.6	−197.1
Be^{++}	4	−433	67.5	−365.5	−368.1	−370.0

§5.　原子核のクーロン・エネルギー

原子核において，核子間の距離は 10^{-13} cm 程度である．この程度の距離では，本来の意味の核力が陽子のクーロン斥力よりはるかに勝っている．後者は摂動として取り扱うことができる．この場合，H_0 は核子の運動エネルギーと本来の核力ポテンシャル・エネルギーとの和であり，摂動 V は核内にある Z 個の陽子のクーロン斥力の項 $Z(Z-1)/2$ 個から成る．すなわち

$$V = \sum_{i<j\leqslant Z} \frac{e^2}{r_{ij}} \tag{21}$$

（$r_{ij} = |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j| = i$ 番目と j 番目の陽子の距離）．

クーロン場の存在によって，定常状態のエネルギー準位に生じるずれ E_c を，摂動法によって評価しよう．

摂動のない状態のスピンを j とすれば，この状態は $(2j+1)$ 位の縮退をもつ．言いか

えると，全角運動量の成分 J_z がとる $(2j+1)$ 個の値 μ に対応して，摂動のない状態 Φ_μ^j が $(2j+1)$ 個存在し，これらは直交規格化される．

このような縮退があっても，さきに述べた摂動論の結果を適用することはできる．実際，摂動ポテンシャル V は H_0 と同様に回転によって不変である．それゆえ，はっきり決まった角運動量 $(j\mu)$ をもつ状態から成る部分空間 $\mathcal{E}(j\mu)$ のなかで固有値問題を取り扱うことができる．この部分空間においては基底状態に縮退はなく，そのエネルギーに対する第1次補正は (12) によって正確に与えられる．すなわち

$$E_c \simeq \langle \Phi_\mu^j | V | \Phi_\mu^j \rangle. \tag{22}$$

この補正は μ に無関係であることがわかる．その結果，クーロン摂動は縮退を解消しない．実際，この結果はすべての次数について成り立つのである．すなわち，H は H_0 と同じく回転によって不変であるから，H_0 と同じ回転の縮退をもつはずである．

関数 Φ_μ^j は座標のほか，Z 個の陽子と $N \equiv \mathfrak{N} - Z$ 個の中性子の内部スピンに依存する．それは陽子に関して反対称であるから，V の $\frac{1}{2}Z(Z-1)$ 個の項は〔E_c に対して〕同じ寄与をもたらす．すなわち $E_c = \frac{1}{2}Z(Z-1)\varepsilon$,

$$\varepsilon = \langle \Phi_\mu^j | (e^2/r_{12}) | \Phi_\mu^j \rangle = \sum_{\text{スピン}} \int |\Phi_\mu^j|^2 (e^2/r_{12}) \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_Z \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{Z+1} \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\mathfrak{N}}.$$

$\sum_{\text{スピン}}$ は，すべての核子のスピン変数に関する和を表わす．ここでつぎのように置く：

$$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sum_{\text{スピン}} \int |\Phi_\mu^j|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\mathfrak{N}}.$$

$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は陽子1を点 $\boldsymbol{r}_1$ に，陽子2を点 $\boldsymbol{r}_2$ に見いだす確率密度である．こう置けば，

$$\varepsilon = \int (e^2/r_{12}) \rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2.$$

E_c を評価するためにつぎのきわめて簡単な模型を採用する．すなわち二つの陽子の位置のあいだの相互関係をすべて無視して

$$\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \rho(\boldsymbol{r}_1)\rho(\boldsymbol{r}_2) \tag{23}$$

と置き (²)，密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ としては，半径 R の球のなかの一様な電荷分布の密度をとる．すなわち

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} 3/4\pi R^3 & (r < R \text{ のとき}) \\ 0 & (r > R \text{ のとき}). \end{cases} \tag{24}$$

計算は §4 の場合と同様である．積分 I を表わす式 (19) を利用し，上に示した密度の値をそれに代入すれば，積分をすべてすませた結果は

(²) こうすると，E_c はいくらか過大に評価される．実際，すべてのことが同じであっても，パウリの原理によって $\rho(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$ のときもっと小さくなるはずである．

$$E_c \simeq \frac{3}{5}Z(Z-1)\frac{e^2}{R}. \tag{25}$$

これは E_c の評価として比較的大まかなものであるけれども，核力が電荷に無関係であることを確かめるのに，(25) を用いることができる (第 14 章，§15 を参照)．この目的には，荷電スピンの方式を用いると便利である．核力が電荷に無関係であると仮定すると，摂動のないハミルトニアンは荷電空間に対して不変であり，荷電スピンの同じ多重項に対応する状態は同じ結合エネルギーをもつ．荷電スピンの同じ多重項に属する二つの状態の結合エネルギー間に実験的に認められる差は，それらのあいだのクーロン・エネルギーの差に等しい．R の値として

$$R = 1.45 \times \mathcal{N}^{1/3} \times 10^{-13}\,\mathrm{cm}$$

をとれば，鏡映核(*)の基底状態に対しては，(25) を使って，この差に関する筋のとおった説明をすることができる．

§6.　高次の補正

第 2 次補正は (7^2) から導かれる．これを得るには，$n=2$ という特殊な場合について (9) と (11) を書き下し，第 1 次補正を表わす式 (12) と (14) を使う．こうして

$$\varepsilon_2 = \langle 0|V|1\rangle = \left\langle 0\left|V\frac{Q_0}{a}V\right|0\right\rangle \tag{26}$$

$$|2\rangle = \frac{Q_0}{a}(V-\varepsilon_1)|1\rangle = \left[\frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a} - \frac{Q_0}{a^2}V|0\rangle\langle|0\right]V|0\rangle \tag{27}$$

が得られる．

同じようにして高次の補正も定められているが，式を書き上げると長くなる．特殊ではあるが重要な場合，すなわち摂動のないエネルギーに対する低次の補正がすべて 0 である場合には，式が簡単になる．実際，

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \cdots = \varepsilon_{n-1} = 0 \tag{28}$$

という仮定の下に，漸化式 (9) と (11) から

$$\varepsilon_n = \left\langle 0\left|V\left(\frac{Q_0}{a}V\right)^{n-1}\right|0\right\rangle \tag{29}$$

$$|n\rangle = \frac{Q_0}{a}V|n-1\rangle = \left(\frac{Q_0}{a}V\right)^2|n-2\rangle = \cdots = \left(\frac{Q_0}{a}V\right)^n|0\rangle \tag{30}$$

が得られる．条件 (28) はまた

(*) ［訳注］ 二つの原子核で，一方の陽子数と中性子数がそれぞれ他方の中性子数と陽子数に等しいとき，これらは互いに《鏡映核》であると言う．

$$\langle 0|V|0\rangle = \left\langle 0\middle|V\frac{Q_0}{a}V\middle|0\right\rangle = \cdots = \left\langle 0\middle|V\left(\frac{Q_0}{a}V\right)^{n-2}\middle|0\right\rangle = 0 \qquad (28')$$

と書かれる．

この条件が満たされないで，第 n 次まで計算できるということはほとんどない．摂動法が有効なのは，展開の収束が十分に速く，最低次の補正で満足できるときに限る．その上，次数が上るとともに計算の複雑さが増し，たちまち計算不能の状態におちいる．

それにもかかわらず，高次補正の一般的挙動を知っておくのは有用である．これにより，摂動展開の収束の速さについて一つの心象が得られるからである．このために，ε_2 の展開 (26) を考える．表現 $\{|E^0\alpha\rangle\}$ における V の行列要素の関数として，

$$\varepsilon_2 = \sum_{E^0 \neq E^0_a} \frac{\sum_\alpha |\langle 0|V|E^0\alpha\rangle|^2}{E^0_a - E^0} \qquad (31)$$

が得られる．エネルギーの差 $|E^0_a - E^0|$ にくらべて各行列要素 $\lambda\langle 0|V|E^0\alpha\rangle$ が小さいほど，摂動の影響は少ない．もっと一般に，大まかな言い方をすれば，摂動のないハミルトニアンのエネルギー E^0, $E^{0\prime}$ をもつ二つの状態のあいだの行列要素 $\lambda\langle E^0\alpha|V|E^{0\prime}\alpha'\rangle$ がこれらのエネルギーと摂動のないエネルギー E^0_a との差 $|E^0_a - E^0|$, $|E^0_a - E^{0\prime}|$ にくらべて小さいほど，摂動級数の収束は速くなる．

(31) の右辺の和の各項を絶対値に置き換え，補正 ε_2 の上の限界を求めることができる．このため各分母を準位 E^0_a から一番近い準位までのへだたり $\delta E_{\mathrm{min.}}$ に置き換える．その結果，

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{1}{\delta E_{\mathrm{min.}}} \sum_{E^0 \neq E^0_a} \sum_\alpha \langle 0|V|E^0\alpha\rangle\langle E^0\alpha|V|0\rangle$$

すなわち

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{1}{\delta E_{\mathrm{min.}}} \langle 0|VQ_0V|0\rangle.$$

いま Q_0 をその定義式に置き換えると，

$$\langle 0|VQ_0V|0\rangle = \langle 0|V(1-|0\rangle\langle 0|)V|0\rangle = \langle 0|V^2|0\rangle - \langle 0|V|0\rangle^2 = (\Delta V)^2$$

となり，ΔV は状態 $|0\rangle$ における摂動ポテンシャルの標準偏差である．したがって

$$|\varepsilon_2| \leqslant \frac{(\Delta V)^2}{\delta E_{\mathrm{min.}}} \qquad (32)$$

と書くことができる．

§7.　剛体回転子に関するシュタルク効果

一般的な規則として，第2次補正 ε_2 の計算は ε_1 の計算よりはるかに長くなる．ε_1 の

方はポテンシャル V の行列要素を一つ評価するだけであるが，ε_2 の計算は，(31) を見ればわかるように，(31) の右辺の和のなかに現われる V の行列要素の無限列を評価し，さらに足し算を行なうことである．しかし，(31) に現われる行列要素がほとんどすべて 0 になり，和は事実上有限個の項しか含まないことが起こる．このタイプの単純化はつぎの例によって明らかにされる．

シュタルク効果による剛体回転子の準位の移動を調べよう．この型の問題は，電場内における 2 原子分子の分極率を研究するときに現われる．剛体回転子は，振動の量子が無限に大きいとみなされる極限において，2 原子分子の核の運動を表わす．この系の自由度は空間内に回転子の方向を定める角変数 (θ,φ) だけである．角運動量を $\boldsymbol{L}$，慣性モーメントを $I=mr_0^2$ とする（$m\equiv$ 換算質量，$r_0\equiv$ 核間の距離）．回転子のハミルトニアンは

$$H_0=\frac{\boldsymbol{L}^2}{2I}$$

であり，この固有関数は球面調和関数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ である．調和関数 Y_l^m によって表わされるベクトルを $|l\,m\rangle$ と書くことにする．このベクトルに対応する固有エネルギーは l だけによって決まる．すなわち

$$H_0|l\,m\rangle=E_l^0|l\,m\rangle,\qquad E_l^0=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1).$$

z 軸方向を向いた一様な電場 $\mathcal{E}$ が存在するとき，この系のハミルトニアンには

$$V=-d\mathcal{E}\cos\theta$$

という項が付け加えられる．ただし d は回転子の電気双極子モーメントである．この項の効果を摂動法によって計算してみよう．

表現 $\{|l\,m\rangle\}$ において，V を表わす行列の要素はほとんどすべて 0 である [3]．

$$\langle l_1m_1|V|l_2m_2\rangle\neq 0$$

が成り立つためには，

$$m_1=m_2\qquad\text{および}\qquad l_1=l_2\pm 1$$

が必要である（付録 C の (16) と (23) を参照）．これらの条件が満たされるとき，行列要素はつぎの式から導き出される（付録 B の (90) を参照）：

$$\langle l\,m|\cos\theta|l-1\ m\rangle=\langle l-1\ m|\cos\theta|l\,m\rangle=\left(\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}\right)^{1/2}.\tag{33}$$

準位 $l=0$ を例外として，摂動のないときの準位はすべて縮退している．しかし，H_0 と $H\equiv H_0+V$ はどちらも L_z と交換する．L_z の固有値 m の部分空間を $\mathcal{E}_m$ とする．

---

(3) これらの注目すべき性質は，V が 1 位の既約テンソル演算子の $q=0$ の成分であること，および偶奇性 (-1) をもつことから出てくる．

これらの交換可能性により，H の固有値問題を各部分空間 $\mathcal{E}_m$ ごとに切り離して解くことができる．これらの一つ一つにおいては，H_0 のスペクトルは完全に単純であり，上に説明した摂動法が適用される．

そこで摂動のない状態 $|l\,m\rangle$ を $\mathcal{E}_m$ において考えよう．上に注意した V の選択規則により，

$$\langle l\,m|V|l\,m\rangle = 0.$$

それゆえ，エネルギー準位における第1次補正は0である．第2次補正は公式 (31) によって与えられる．同じ選択規則により，和はそれぞれ $l+1$ と $l-1$ に対応する二つの項だけになる．すなわち

$$\begin{aligned}\varepsilon_2^{lm} &= \frac{2I(d\mathcal{E})^2}{\hbar^2}\sum_{l'\neq l}\frac{|\langle l\,m|\cos\theta|l'\,m\rangle|^2}{l(l+1)-l'(l'+1)}\\ &= \frac{2I(d\mathcal{E})^2}{\hbar^2}\left[\frac{|\langle l\,m|\cos\theta|l+1\ m\rangle|^2}{l(l+1)-(l+1)(l+2)}+\frac{|\langle l\,m|\cos\theta|l-1\ m\rangle|^2}{l(l+1)-l(l-1)}\right].\end{aligned}$$

右辺の括弧のなかは公式 (33) を使って計算される．むずかしくはない処理を多少加えたのち，最後には

$$\varepsilon_2^{lm} = \frac{(d\mathcal{E})^2}{E_l^0}\,\frac{l(l+1)-3m^2}{2(2l+1)(2l+3)}$$

を得る．それゆえ，エネルギー・スペクトルは公式

$$E_{lm} \simeq E_l^0\left[1+\left(\frac{d\mathcal{E}}{E_l^0}\right)^2\frac{l(l+1)-3m^2}{2(2l-1)(2l+3)}\right] \tag{34}$$

によって2次まで与えられる．

縮退は一部分しか除去されていない．エネルギー E_{lm} が事実上 l と m^2 だけに依存し，〔本質的には〕l と m に依存しないからである．それゆえ，反対符号の m の値に対応する状態は同じエネルギー準位にとどまる．事実，このように残された縮退はすべての次数に対して存続する．この縮退は，ハミルトニアン H がシュタルク効果の対称性，すなわち Oz を通る平面に関する鏡映の群によって不変であることに由来する．この点には§13でもう一度たちもどるであろう．

II．縮退した準位の摂動

§8.　基礎理論

摂動のないハミルトニアンの固有値 E_a^0 が g_a 重に縮退しているとする．われわれは，§2の記号をもう一度採用し，E_a^0 の部分空間を $\mathcal{E}_a^0$ で表わし，この部分空間への射影子を P_0 とする．

この仮定の下では，$\lambda \to 0$ のとき H の二つ以上の固有値が E_a^0 に近づくということも起こりうる．これらの値を $E_1, E_2, \cdots, E_n$ とし，それぞれの縮退の位数を $g_1, g_2, \cdots, g_n$，それぞれの部分空間を $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \cdots, \mathcal{E}_n$ とする．

$$g_1 + g_2 + \cdots + g_n = g_a$$

であり，$\lambda \to 0$ のとき空間 $\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \cdots + \mathcal{E}_n$ は $\mathcal{E}_a^0$ に近づく．言いかえれば，空間 $\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \cdots + \mathcal{E}_n$ への射影を P とするとき，P は λ の連続関数であり，

$$P \xrightarrow[\lambda \to 0]{} P_0$$

が成り立つ．

摂動によって H の固有値と固有関数を決定する問題は，摂動のない固有値が縮退していないときほど単純ではない．第 III 節において，この問題の厳密な解法を一つ述べるが，それによれば問題をいくらでも高い次数の近似で解くことができる．ここでは最も低い次数に限定し，厳密さを気にしないで，§2 の漸化法がどのような結果をもたらすかを調べるだけにとどめる．

列 $E_1, E_2, \cdots, E_n$ に属する固有値の一つを E とし，E に関する固有ベクトルの一つを $\psi\rangle$ とする．$\lambda \to 0$ となる極限において，$|\psi\rangle$ は空間 $\mathcal{E}_a^0$ のある一つのベクトル $|0\rangle$ に近づく．今のところこれ以上詳しいことは言えない．E と $|\psi\rangle$ が展開 (5) と (6) によって表わされ，規格化条件 (4) を満たすことを承認する．これらの展開の係数は式 (7) と (8) によって互いに結びつけられ，漸化法によって決定される．

(7^0) により $|0\rangle$ は $\mathcal{E}_a^0$ に属さなければならない．すなわち

$$P_0|0\rangle = |0\rangle. \tag{35}$$

(7^1) から，$\mathcal{E}_a^0$ へ射影することにより

$$P_0(V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \tag{36}$$

が得られ，その補空間へ射影することにより

$$Q_0|1\rangle = \frac{Q_0}{a}V|0\rangle \tag{37}$$

が得られる．ここでわれわれは

$$Q_0 = 1 - P_0 \tag{38}$$

と置き，(10) によって Q_0/a を定義している．

(36) は空間 $\mathcal{E}_a^0$ における固有値方程式の一つであり，ε_1 はこの空間の演算子 P_0VP_0 の固有値で，$|0\rangle$ は ε_1 に対応する固有ベクトルである．表現 $|E_a^0\alpha\rangle$ において，この式は

$$\sum_{\alpha'}\langle E_a^0\alpha|V|E_a^0\alpha'\rangle\langle E_a^0\alpha'|0\rangle = \varepsilon_1\langle E_a^0\alpha|0\rangle$$

と書かれる．それゆえ，第1次補正 ε_1 は

$$V_{\alpha\alpha'} \equiv \langle E_a^0\alpha | V | E_a^0\alpha' \rangle$$

を要素とする $g_a \times g_a$ 型行列を対角化することによって得られる．ε_1 として可能な値はこの行列の固有値である．ε_1 の異なる値が g_a 個あるならば，それらはいずれも単純であり，縮退は摂動によって完全に除かれる．異なる値の個数が g_a より小さいときは，それらのうちのいくつかは縮退しており，縮退は一部分しか除去されない．

第1次補正 ε_1 が単純な固有値であるとき，対応する固有状態は第0次まで完全に決定される．ベクトル $|0\rangle$ は式 (7^0) と (7^1) により (*) 定数を除いて定められる．このとき，$|\psi\rangle$ の第1次補正については，(37) によって $\mathcal{E}_a^0$ の補空間への射影 $Q_0|1\rangle$ は定められるけれども，$\mathcal{E}_a^0$ への射影は，条件 (4) を別にして，不定のままである．ε_1 が g_1 重に縮退しているとき (**)，(7^0) と (7^1) により (*)，ベクトル $|0\rangle$ はこの固有値に対する g_1 次元の部分空間に属することが要求されるが，それ以上ではない．もっと完全に $|0\rangle$ を定めるためには，さらに高い次数まで計算を進めなければならない．

ε_1 の値を一つ選んでしまうと，(7^2) をこの固有値の部分空間に射影することによって第2次補正 ε_2 が得られる．この部分空間を $\mathcal{E}_a^{(1)}$ によって表わす．これは $\mathcal{E}_a^0$ に含まれる．部分空間 $\mathcal{E}_a^{(1)}$ への射影子を $P^{(1)}$ で表わし，$\mathcal{E}_a^0$ に関する $\mathcal{E}_a^{(1)}$ の補空間への射影子を P' で表わす．そうすると

$$P_0 = P^{(1)} + P', \qquad P^{(1)} + P' + Q_0 = 1.$$

このとき

$$P^{(1)}H_0 = P^{(1)}P_0H_0 = E_a^0P^{(1)}$$
$$P^{(1)}V = P^{(1)}V(P^{(1)} + P' + Q_0) = \varepsilon_1P^{(1)} + P^{(1)}VQ_0$$

が成り立つ．そしていま考えている式 (7^2) の射影により，

$$P^{(1)}VQ_0|1\rangle - \varepsilon_2P^{(1)}|0\rangle = 0$$

が得られる．これから (37) を考えに入れて，

$$P^{(1)}\left[\left(V\frac{Q_0}{a}V\right) - \varepsilon_2\right]|0\rangle = 0. \tag{39}$$

(39) の第2次補正に対する関係は，(36) の第1次補正に対する関係と似ている．ε_1 が空間 $\mathcal{E}_a^0$ における P_0VP_0 の固有値であるのと同じように，ε_2 は空間 $\mathcal{E}_a^{(1)}$ における $P^{(1)}V(Q_0/a)VP^{(1)}$ の固有値で，ベクトル $|0\rangle$ はそれに対応する固有ベクトルである．

ε_1 が単純な固有値であるとき $(g_1 = 1)$，$|0\rangle$ は低次の式によって決められ，縮退のない場合と同様に

(*) ［訳注］ (7^0)，(7^1) よりむしろ固有値方程式 (36) を考えればよい．

(**) ［訳注］ 原文は $\mathcal{E}_1$ となっているがこれは誤まりであり，g_1 も前頁の g_1 とは別の値である．

$$\varepsilon_2 = \left\langle 0 \middle| V\frac{Q_0}{a}V \middle| 0 \right\rangle$$

が得られる．反対に $g_1 > 1$ のときは，ε_2 の計算は $g_1 \times g_1$ 型行列の固有値を求めることになる．これらの固有値がすべて異なるとき，縮退は2次まで完全に除去される．そうでないときは，必要に応じてもっと高い次数まで計算を進めなければならない．

どのような次数までいっても縮退がけっして完全に除去されないということも起こる．われわれはすでに，核のクーロン・エネルギー（§5）に関連し，また剛体回転子に対するシュタルク効果（§7）に関連して，このことを確かめる機会をもった．H_0 と H の対称性を吟味するだけで，摂動のない準位の縮退が摂動 λV によってどの程度まで取り除かれるかを予見できることが非常に多い．この点は §13 で系統的に論じる．その前に，原子物理学から第1次の計算の例をいくつか引き出し，それらによってこの方法を明らかにしよう．

§9. スピン－軌道力がないときの原子の準位

Z 電子の原子を考える．第14章でこのような系のエネルギー準位の構造を調べたときには，中心力による近似をとり（第14章，§12），ハミルトニアン H を

$$H_C = \sum_{i=1}^{Z}\left[\frac{p_i^2}{2m} + V_C(r_i)\right]$$

に置き換えた．このようにするとき，電子相互の静電斥力は平均として考慮されるにすぎない．正確なクーロン相互作用と H_C の位置エネルギーとの差を V_1 で表わせば，

$$V_1 = \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} - \sum_i\left[V_C(r_i) + \frac{Ze^2}{r_i}\right]. \tag{40}$$

H のなかで電子のスピンによる項を無視すれば，

$$H \simeq H_C + V_1 \tag{41}$$

と書くことができ，V_1 を摂動として取り扱うことによって，H のスペクトルを H_C のスペクトルから導き出すことができる．スピンによる力を正しく考慮するために，このような取り扱い方に加えなければならない修正については，§10 で調べる．

一般論として，H_C の各固有値は非常に強く縮退している．摂動 V_1 によってこの縮退は少なくとも部分的に取り除かれる．H_C の与えられた一つの固有値の近くにある H の準位は，この固有値の部分空間において V_1 を対角化することによって得られる．特に，H の基底状態と初めのいくつかの励起状態は，H_C の基底固有値 E_0 の部分空間 $\mathscr{E}_0$ において V_1 を対角化することによって得られる．

H の対称性によって，この対角化問題は非常に簡単になる．H が（H_C と同様）スピン

に無関係であるから，全体の回転によって不変であるばかりでなく，軌道変数だけの回転によっても，スピンだけの回転によっても不変である．H は全角運動量 $\boldsymbol{J}$ と交換するばかりでなく，全軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ および全スピン $\boldsymbol{S}$ ともまた交換する (4)．H_C も同じ対称性をもつから，演算子 $P_0V_1P_0$ もまた $\boldsymbol{L}$ および $\boldsymbol{S}$ と交換する．$\mathcal{E}_0$ におけるその固有状態は $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z, S_z の固有値によって分類され，その固有値は L と S だけで決まり，それぞれ $(2S+1)(2L+1)$ 重に縮退している．

$\mathcal{E}_0$ における標準基底 $\{\boldsymbol{L}^2L_z, \boldsymbol{S}^2S_z\}$ のベクトルを $|\gamma LSM_LM_S\rangle$ で表わす——量子数 γ を用いて，同じ軌道角運動量と同じスピンをもつこの基底のベクトルを互いに区別する．この基底に対応する表現において，$P_0V_1P_0$ はきわめて簡単な形をとり，

$$\langle\gamma LSM_LM_S|V_1|\gamma'L'S'M'_LM'_S\rangle = \delta_{LL'}\delta_{SS'}\delta_{M_LM'_L}\delta_{M_SM'_S}\mathcal{V}^{(LS)}_{\gamma\gamma'}$$

となる．それゆえこれを対角化するには，量子数の組 (LS) の一つ一つに対応する行列 $\mathcal{V}^{(LS)}_{\gamma\gamma'}$ を対角化すればよい．

一例として炭素原子をとる．その基底配置は $1s^2 2s^2 2p^2$，すなわち二つの閉じた殻 $1s$ と $2s$，および 2 電子を含む開いた殻 $2p$ である．これは ${}_6C_2 = 15$ 重に縮退している．(LS) のとりうる値の組の個数と，その縮退の位数，すなわちそれらに対応する $(2L+1)\times(2S+1)$ 個のベクトルから成る組の個数を求めよう．そのためには，閉殻の存在を無視することができ（問題 3），$2p$ 状態の電子 2 個だけ考えればよい．

パウリの原理を無視すれば，$2p$ 状態の 2 電子によってつくられるスペクトル項のうち異なるものは

$$^3S,\quad ^3P,\quad ^3D,\quad ^1S,\quad ^1P,\quad ^1D$$

である．スピンの交換に対してスピン 3 重項とスピン 1 重項はそれぞれ対称および反対称であり，軌道変数の交換に対して S 状態と D 状態は対称，P 状態は反対称であるから，このリストにあるスペクトル項のうちパウリの原理を満たすものは

$$^3P,\quad ^1S,\quad ^1D$$

である．すなわち，予想されたように全部で $9+1+5=15$ 個の線形独立な反対称状態である．基底 $\{LSM_LM_S\}$（この特殊な場合には量子数 γ は不要である）において，摂動 V_1 は必然的に対角型である．それは全部で三つの異なる固有値 $\mathcal{V}(^3P)$, $\mathcal{V}(^1S)$, $\mathcal{V}(^1D)$ をもち，これらの縮退の位数はそれぞれ 9，1，5 である．個別的な状態の波動関数が知られたときには，これらの固有値の数値計算も非常に困難なものではない．計算の結果，

(4) さらに H は軌道変数だけの置換によっても不変であるが，付録 D，§18 の定理によれば，この対称条件はスピンの回転による不変性と同値である．その根拠はパウリの原理にある．

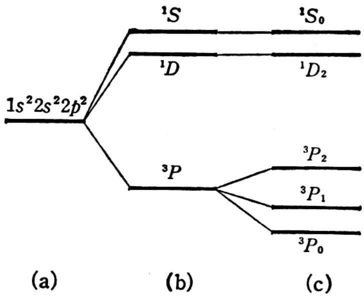
準位 ^3P は他の二つよりずっと低い (16•1 図を参照) [5].

§10. スピン－軌道力. *LS* 結合, *jj* 結合

H の式 (41) は近似的なものにすぎない. *H* はさらに電子のスピンに依存する相互作用の項を含む. これを V_2 で表わすと,

$$H = H_C + V_1 + V_2. \qquad (42)$$

第1近似として, 各電子は他の電子と独立にポテンシャル $V_C(r)$ のなかを動き, そのスピン $\boldsymbol{s}$ は第13章の法則 (95) にしたがってその軌道角運動量と結びつく. それゆえきわめて良い近似で



16•1図 炭素原子の基底配置の準位. (a) 中心力場による近似 ($V_1 = V_2 = 0$) ; (b) スピン－軌道結合を無視するとき ($V_2 = 0$) ; (c) スピン－軌道結合を考えに入れるとき.

$$V_2 \simeq \sum_{i=1}^{Z} (\boldsymbol{l}_i \cdot \boldsymbol{s}_i) g(r_i), \qquad (43)$$

ただし

$$g(r) = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}V_C}{\mathrm{d}r} \qquad (44)$$

が得られる.

この効果を正確に考慮に入れるためには, V_1 をすべて $V_1 + V_2$ に置き換え, §9 の処理法を繰り返せばよい. しかしながら, $V_1 + V_2$ の対称性は V_1 の対称性ほど広い範囲におよばない. すなわち $V_1 + V_2$ は $\boldsymbol{J}$ と交換するが, $\boldsymbol{L}$ とも $\boldsymbol{S}$ とも交換しない. そのため, 摂動のない固有値の部分空間のなかで摂動を対角化する問題は, スピン－軌道項が付け加えられるとき, 前よりもずっと複雑になる. 比較的簡単なのは, 二つの項 V_1, V_2 のうちの一方が他方にくらべてはるかに小さいという場合だけである.

$V_1 \gg V_2$ ならば, 第1近似において V_2 を無視することができる. 各配置ごとに準位の列が一つ与えられ, その準位ははっきり決まった組 (*LS*) に一つ一つ対応する. これら

---

(5) 一般的な規則として, 同じ一つの配置の準位はいつでも全スピンの減少する順に並ぶ (フントの規則). 実際, (40) により V_1 は二つの項を含むけれども, 第2項はすべての準位に同じ寄与を与える. それゆえ, 準位の列の順序はただ斥力の項 $\sum e^2/|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|$ の大きさだけで決まる. この項は, 電子が互いに遠ざかるほど, したがって波動関数の軌道部分が反対称的になるほど小さくなる. 一方, S が大きくなるほど波動関数のスピン部分は対称的になり (付録D, §18), したがって軌道部分は反対称的になる.

の準位はそれぞれ $(2L+1)(2S+1)$ 重に縮退している（§9を参照）．これらに対応する固有ベクトルは，この配置における一電子状態からつくられるスレーター行列式の特殊な線形結合である．これらは $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, L_z, S_z の固有ベクトルである．つぎに，これらの準位の一つ一つに対する部分空間において，V_2 を摂動として取り扱う．J の取りうる値（$J=L+S, L+S-1, \cdots, |L-S|$）の一つ一つに，$(2J+1)$ 重に縮退した V_2 の固有値が対応する．これらに対応する固有ベクトル $|\gamma LSJM\rangle$ は $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z の固有ベクトルである．このように配置のスレーター行列式を結びつけて全角運動量の固有ベクトルをつくる方法を**ラッセル＝ソーンダース結合**または **LS 結合**と名付ける．

$V_2 \gg V_1$ であれば，第1近似において V_1 を無視できる．ハミルトニアン H_C+V_2 は，ポテンシャル $V_C+(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})g(r)$ のなかの独立な粒子のハミルトニアンである．ばらばらに考えた各電子の全角運動量を $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$ とする．スピン－軌道結合項 $(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})g(r)$ の効果は，0でない軌道角運動量をもった個別的状態の縮退を一部分除去することである．各準位 $l\neq 0$ は二つの準位 $j=l\pm 1/2$ に分かれ，対応する固有ベクトルには量子数 $(nljm)$ を目じるしとして付けることができる．ここまでくれば，ハミルトニアン H_C+V_2 の扱いはハミルトニアン H_C そのものの取り扱い（第14章，§12）とあらゆる点で同様である．H_C の各配置により，H_C+V_2 の配置がいくつか与えられる．H_C+V_2 の配置を決めてから，そのおのおのにおいてポテンシャル V_1 を摂動として取り扱う．J のとりうる値の一つ一つに，$(2J+1)$ 重に縮退した固有値が（いくつか）対応する．これに対応する固有ベクトルは $\boldsymbol{j}_i^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z の固有ベクトルである．このように基底配置のスレーター行列式を結びつけて全角運動量をつくる方法を **jj 結合**と名づける．

下の表はいま述べた二つの結合法を図式的に表わしたものである．

LS 結合	jj 結合
(V_1)　$\boldsymbol{L}=\sum_i \boldsymbol{l}_i$　　$\boldsymbol{S}=\sum_i \boldsymbol{s}_i$	(V_2)　$\boldsymbol{j}_i=\boldsymbol{l}_i+\boldsymbol{s}_i$
(V_2)　$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$	(V_1)　$\boldsymbol{J}=\sum_i \boldsymbol{j}_i$

Z が増すとき V_2 の相対的な重要さが急速に増大する[6]．軽い原子あるいは中程度の原

(6) V_1 はゆらぎの項であり，これが各電子のエネルギーにおよぼす効果はおおよそ $\sqrt{Z}$ のように増大する．各電子のスピン－軌道結合のエネルギーはほぼ Z^2 のように増大する．実際，トーマス＝フェルミの模型を用いてこれを評価することもできる．この結合は $(1/r)(\mathrm{d}V_C/\mathrm{d}r)$ の平均値に比例し，第14章§13の記号によれば

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V_C}{\mathrm{d}r}\simeq\frac{Z^2e^2}{b^3}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\chi}{x}\right)$$

が成り立つ．

子においては，LS 結合による取り扱いがごく良い近似を与える．重い原子（おおよそ Pb から先）においては，V_1 と V_2 とが同じ程度の大きさをもち，基底配置の準位の構造は，LS および jj 結合が与えるものの中間である．

§11. LS 結合における原子．スピン－軌道相互作用の効果

LS 結合 ($V_1 \gg V_2$) におけるスピン－軌道相互作用の効果を調べる．この場合，V_2 はハミルトニアン $H_C + V_1$ の準位に作用する一つの摂動として取り扱われる．

$H_C + V_1$ のスペクトルについては §9 で述べた．各準位は L と S の決まった値に対応し，$(2L+1)(2S+1)$ 位の縮退を示す．対応する固有ベクトルのつくる部分空間は，決まった軌道角運動量とスピンをもつ一連のベクトルによって張られる．それらを $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ で表わす．量子数 α によって，この準位が H_C のどのような配置に属するかを指定し，また場合によってはこれを使って，同じ配置に属し，同じ L と S の値の組をもつ〔別の状態の〕準位と区別する．

摂動のエネルギーを得るには，摂動のない準位の一つ一つに対する部分空間 $\mathcal{E}(\alpha LS)$ において，V_2 を対角化すればよい．部分空間 $\mathcal{E}(\alpha LS)$ における V_2 の行列要素はまた演算子 $A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})$ の要素と同じであり，A は摂動のない準位 (αLS) に特有の定数である．すなわち

$$\langle \alpha LSM_LM_S|V_2|\alpha LSM'_LM'_S\rangle = A\langle \alpha LSM_LM_S|(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})|\alpha LSM'_LM'_S\rangle. \quad (45)$$

実際，この基底ベクトルは〔電子の置換に関して〕反対称であるから，V_2 の Z 個の項（式 (43)）の行列要素に対する寄与は等しい．それゆえその一つ，たとえば $(\boldsymbol{l}_1\cdot\boldsymbol{s}_1)g(r_1)$ という項の寄与を調べればよい（何の混乱も生じえないから，これからあとは添字 1 を省く）．$\boldsymbol{l}$ の任意の成分 l_m と $\boldsymbol{s}$ の任意の成分 s_μ から，演算子 $g(r)l_ms_\mu$ がつくられる．これは軌道変数だけの回転に関する既約ベクトル演算子の成分でもあり，同時にスピンだけの回転に関する既約ベクトル演算子の成分でもある．演算子 L_mS_μ も同じ性質をもつ．ウィグナー＝エッカルトの定理を適用し，わかりやすい計算をいくらかすれば，このことから

$$\langle \alpha LSM_LM_S|g\,l_ms_\mu|\alpha LSM'_LM'_S\rangle = a\langle \alpha LSM_LM_S|L_mS_\mu|\alpha LSM'_LM'_S\rangle$$

が導かれる（第 13 章，問題 19 を参照）．ここで a は磁気量子数 M_L, M'_L, M_S, M'_S, m, μ に無関係な定数である．その結果，

$$\langle \alpha LSM_LM_S|g(r)(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})|\alpha LSM'_LM'_S\rangle = a\langle \alpha LSM_LM_S|(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})|\alpha LSM'_LM'_S\rangle.$$

各項に Z を掛け，$A = Za$ と置けば関係 (45) が得られる．

部分空間 $\mathcal{E}(\alpha LS)$ において，表現 $\{\alpha LSM_LM_S\}$ に関して V_2 は対角型ではないけれども，これは回転によって不変であるから，表現 $\{\alpha LSJM\}$ に関しては明らかに対角型である．この表現の基底ベクトルは，この部分空間に属する $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有ベクトルで

ある．関係 (45) により固有値を定めることができる．実際，

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{S}^2 + 2(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})$$

であるから，

$$\langle \alpha LSJM | V_2 | \alpha LSJM \rangle = \frac{1}{2} A \langle \alpha LSJM | (\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2) | \alpha LSJM \rangle$$
$$= \frac{1}{2} A\hbar^2 [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \qquad (46)$$

要約すれば，摂動のない準位 (αLS) は，J のとりうる値 $(J = L+S, \cdots, |L-S|)$ の個数と同じ個数の準位に分かれ，それぞれの縮退の位数は $(2J+1)$ であり，摂動のエネルギーは (46) によって与えられる．

16•1 図によって LS 結合による炭素の基底配置の準位の構造が与えられている．${}^3P$ 状態だけがスピン－軌道エネルギー項の存在によって影響を受け，三つの準位 ${}^3P_0$, ${}^3P_1$, ${}^3P_2$ に分かれる．この特殊な場合には $A > 0$ である．したがってこれらの準位は J の増す順序に並べられ，基底状態は ${}^3P_0$ 状態である．

§ 12. ゼーマン効果とパッシェン＝バック効果

ここまでの三つのパラグラフでは，外部の場がない場合における原子の準位の構造について論じてきた．ここでは定磁場 $\mathcal{H}$ のなかにある原子を考える．磁場が 0 のときの原子のハミルトニアンを H_0 とすれば，磁場が存在するときのハミルトニアンは，それに

$$W = -\frac{e}{2mc}[\mathcal{H}\cdot(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S})] \qquad (47)$$

という項を付け加えて得られる（第 13 章 (96) を参照）($\mathcal{H}^2$ 程度の《反磁性》項も付け加えられるがこれを無視する (*))．

ゼーマン効果

$\mathcal{H}$ が十分小さいとき，W を摂動として取り扱うことができる．H_0 は回転により不変であるから，H_0 の各準位は，与えられた全角運動量の値 J に対応する．ここで $J \neq 0$ と仮定しよう [7]．この場合，準位は $(2J+1)$ 重に縮退する．そして摂動 W によりこの縮退は除かれる．

摂動のない準位の一つを E_0 で表わし，その角運動量を J とし，固有値 E_0 の部分空間を張る $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有ベクトルを $|E_0JM\rangle$ で表わす．磁場の導入による準位のずれは行列

(*) ［訳注］ 第 13 章，脚注 [17]（第 2 巻 134 頁）を参照．

[7] $J = 0$（反磁性原子）ならば，準位のずれが $\mathcal{H}$ の 1 次の程度では 0 になる．このずれを $\mathcal{H}$ の 2 次の程度まで計算するときには，《反磁性》項の寄与を無視することができない．

$$\langle E_0 JM | W | E_0 JM' \rangle$$

の固有値である．z 軸を $\mathcal{H}$ に平行にとれば，この行列の対角化は自動的に行なわれる．この場合には W が J_z と交換するからである．さらに，ウィグナー＝エッカルトの定理によれば，部分空間 E_0 (*) におけるベクトル演算子 $\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}$ と $\boldsymbol{J}$ の行列要素は比例する．すなわち

$$\langle E_0 JM | (\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}) | E_0 JM' \rangle = g \langle E_0 JM | \boldsymbol{J} | E_0 JM' \rangle. \tag{48}$$

比例定数 g はこれらの演算子の縮小行列要素の比に等しい．これは考えている準位 E_0 に特有の量である．特に，

$$\langle E_0 JM | (L_z + 2S_z) | E_0 JM' \rangle = gM\hbar\, \delta_{MM'}.$$

先に指定したように軸を選べば，

$$W = -\frac{e\mathcal{H}}{2mc}(L_z + 2S_z).$$

したがって，ボーア磁子を μ_B で表わせば（第13章 (74)），

$$\langle E_0 JM | W | E_0 JM' \rangle = -Mg\mu_B \mathcal{H}\, \delta_{MM'}.$$

結論として，摂動により縮退は完全に取り除かれて $(2J+1)$ 個の準位が得られ，それらは公式

$$E = E_0 - Mg\mu_B\mathcal{H} \qquad (M = -J, -J+1, \cdots, +J) \tag{49}$$

によって与えられる．これがゼーマン効果の公式である．

LS 結合におけるランデ因子の計算

ランデ因子 g は (48) によって定義される．LS 結合の妥当性に関する条件が満たされていると仮定し，§11 の記法にしたがい，場が 0 のときの原子の準位を特徴づける量子数を αLSJ で表わそう．

g を決めるために，平均値

$$\langle \boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}) \rangle \equiv \langle \alpha LSJM | (\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})) | \alpha LSJM \rangle$$

を二通りの異なる方法で計算する．

a) 恒等式

$$\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}) = \boldsymbol{J}^2 + \boldsymbol{S}^2 + \frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2)$$

により，

$$\langle \boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}) \rangle = \frac{1}{2}[3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]\hbar^2$$

となる．

(*) ［訳注］ $2J+1$ 個のベクトル $|E_0 JM\rangle$ の張る空間のこと．

b) 表現 $\{\alpha LSJM\}$ において直接に行列の掛け算を行ない，関係 (48) を使えば，

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})\rangle &= \sum_{i=xyz}\sum_{M'}\langle \alpha LSJM|J_i|\alpha LSJM'\rangle\langle \alpha LSJM'|(L_i+2S_i)|\alpha LSJM\rangle \\ &= g\langle \alpha LSJM|\boldsymbol{J}^2|\alpha LSJM\rangle \\ &= gJ(J+1)\hbar^2\end{aligned}$$

となる（第13章，問題19を参照）．二つの結果を対照して，

$$g = 1+\frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{50}$$

が得られる．

パッシェン＝バック効果

ゼーマン効果の定理が正当化されるのは，摂動 W による準位の分離が摂動のない準位からすぐ隣りの準位までの距離にくらべて小さいときだけである．LS 結合の妥当性に関する条件が満たされている場合，これは W がスピン－軌道相互作用 V_2 にくらべて小さいと仮定することである．あるいはもっと正確に言えば，

$$|g|\mu_B\mathscr{H} \ll A\hbar^2$$

である（(46) と (49) を参照）．

逆に，磁場が十分に強く，

$$A\hbar^2 \ll \mu_B\mathscr{H}$$

が成り立つとする．この場合には，スピン－軌道相互作用の効果は磁場との相互作用の効果にくらべて無視できる．このとき後者はハミルトニアン

$$H_C + V_1$$

の準位に作用する摂動として取り扱うことができる．§11の記法によると，摂動のないこれらの準位はそれぞれ量子数 (αLS) によって目じるしが付けられ，その縮退の位数は $(2S+1)(2L+1)$ である．摂動によってこの縮退は一部分除かれる．この効果はパッシェン＝バック効果と名づけられる．摂動のない準位 $E_{\alpha LS}$ に関する準位のずれを得るには，その部分空間において W を対角化する．W は L_z および S_z と交換するから，摂動の行列は表現 $\{\alpha\ L\ S\ M_L\ M_S\}$ において対角型となる．すなわち

$$\langle \alpha\ L\ S\ M_L\ M_S|W|\alpha\ L\ S\ M'_L\ M'_S\rangle = -\mu_B\mathscr{H}(M_L+2M_S)\delta_{M_LM'_L}\delta_{M_SM'_S}.$$

したがって準位のずれは公式

$$E = E_{\alpha LS} - \mu_B\mathscr{H}(M_L+2M_S)$$
$$(M_L = -L,\cdots,+L;\ M_S = -S,\cdots,+S)$$

によって与えられる．

$L\neq 0,\ S\neq 0$ であれば，こうして得られた準位のいくつかはなお縮退している．スピン－軌道相互作用の小さな項を導入することにより，これらの残った縮退は少なくとも一

部分除かれる.

§13. 縮退の除去と H の対称性 (*)

これまでに述べた例 (§5, 7, 9, 10, 11, 12) によって明らかになったように，縮退のある準位を摂動によって計算するときには，対称性を考えることがたいせつである．縮退した固有値の存在はほとんどつねにハミルトニアンの対称性と結びつけられる．H_0 と H を不変にする群がわかれば，準位 E_a^0 の縮退が摂動によってどの程度まで除かれるかを予想することができ，摂動エネルギーの計算が非常にやさしくなる．

すでに研究した例ではどの場合も，摂動のないハミルトニアン H_0 が一つの群 G_0 に関して不変であり，摂動 λV が G_0 のある部分群 G に関して不変である．たとえば，剛体回転子に対するシュタルク効果 (§7) の場合には，G_0 は回転－反転群，G は z 軸を通る平面に関する鏡映の群である (第15章，§14を参照).

もう一度，第15章§11の記号を採用する．G に属する演算子によりわれわれはオブザーバブル〔の集合〕J と M をつくることができる．それらの固有値〔の組〕をそれぞれ量子数〔の組〕j と μ で表わす．j の値の一つ一つに対応して，群の既約表現が一つはっきり定まる．この表現の次数を d_j とする．与えられた j に対して，μ のとりうる値が d_j 個存在し，これによってこの表現の d_j 個の基底ベクトルが互いに区別される．固有値の組 $(j\mu)$ の一つ一つに，状態空間 $\mathcal{E}$ のある部分空間 $\mathcal{E}(j\mu)$ が対応する．H と H_0 は G に関して不変であり，したがって J および M と交換するから，別々にとった各部分空間 $\mathcal{E}(j\mu)$ のなかで H と H_0 の固有値問題を解くことができ，同じ j の値に対応する d_j 個の部分空間においては，縮退の位数も含めてスペクトルは同じである．

E_a^0 は $\mathcal{E}(j\mu)$ における H_0 の固有値であり，縮退の位数 p_j をもつと仮定する．先に述べたことにより，〔全空間 $\mathcal{E}$ における縮退の位数 g_a に関して〕

$$g_a = \sum_j p_j d_j \tag{51}$$

が成り立つ．$\mathcal{E}(j\mu)$ においては，摂動の導入により ($p_j > 1$ と仮定するとき)，摂動のないときのエネルギーの縮退は完全にあるいは一部分だけ除去される．H が群 G の演算子以外の対称性をもたないならば，問題の縮退は完全に除かれるのが普通であり，p_j 個の異なる準位が生じる．したがって，全空間においては，摂動の導入により，摂動のない準位は最大限 $\sum_j p_j$ 個の異なる準位に分かれる．準位の一つ一つははっきり決まった j の値に対応する．その縮退の位数は，縮退が $\mathcal{E}(j\mu)$ において完全に除かれたとき d_j であり，そうでない場合には d_j の倍数である．

(*) 初めて読むときには，この §13 をとばしてもよい．第15章の結果と，そこで用いられた群論に関するいくつかの概念に訴えるのは，本章のなかでここだけである．

これらの結果は，H が対称性 G をもち，λ の連続関数であって，$\lambda \to 0$ のとき H_0 に近づくという事実だけに基づいている．摂動の計算をどのような次数まで行なっても，これらの結果はそのまま厳密に成り立つ．

部分空間 $\mathcal{E}_a^0$ が群 G に関して既約であるときには，和 (51) がただ一つの項しか含まず [8]，準位 E_a^0 の縮退はどのような次数まで進んでも除かれない．このことは一般に，H_0 が H の対称性以外の対称性をもたない ($G_0 = G$) ときに起こる．われわれは核のクーロン・エネルギーの計算（§5）に関連して，このような例の一つを見た．

これに反して §7 の場合では，G が G_0 より小さい部分群である．$(2l+1)$ 重に縮退した固有値 E_l^0 に対応する部分空間 $\mathcal{E}_l^0$ は $(2l+1)$ 次元である．この空間は G_0 に関して既約であるが，G に関しては ($l \neq 0$ のとき) 可約である．この特殊な場合には（第15章，§14 を参照），J は演算子 l_z^2 であり，その固有値は m^2 であるから，量子数 $|m|$ ($|m| = 0, 1, 2, \cdots$) によって目じるしが付けられる．これに対応する既約部分空間の次元数は

$$d_{|m|} = \begin{cases} 2 & (|m| \neq 0 \text{ のとき}) \\ 1 & (|m| = 0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

である．この場合，関係 (51) は

$$g_l \equiv 2l + 1 = \sum_{|m|=0}^{l} d_{|m|}$$

と書かれる．したがって，摂動により準位 E_l^0 は最大限 $(l+1)$ 個の異なる準位に分かれ，一つ ($|m| = 0$) は単純であり，他はすべて二重に縮退する．これはちょうど §7 の計算で確かめたことである．ここで述べた対称性の考えによって厳密に与えられるものは，縮退の除去に関する上の限界だけであることに十分注意しなければならない．一般的な規則として，摂動の計算を十分先まで進めるならば，この限界まで実際に到達できる．§7 の場合には，第2次まで計算を進めると限界に到達する．

§14. 準　縮　退

二つの準位 E_a^0, E_b^0 が互いにごく近くにあって，摂動 V から導かれる補正が距離 $|E_a^0 - E_b^0|$ にくらべて大きいとき，先に説明した計算法の妥当性はまったく失われる．それにもかかわらず，摂動のないハミルトニアンと摂動の定義を適当に修正するならば，このような《準縮退》の場合も摂動によって処理することができる．

---

[8] G に関して不変な部分空間 $\mathcal{E}_a^0$ は，この群の一つの表現を定め，その次数は g_a である．この表現を G_a とする．(51) により，この表現の既約成分への分解は $G_a \simeq \sum_j p_j G^{(j)}$ となる．

H_0 の固有値 E_i^0 に対応する部分空間への射影子を P_i^0 で表わす．このとき

$$H_0 = \sum_i E_i^0 P_i^0.$$

上に修正と言ったのは，本質的には H_0 のこのような表現において，E_a^0 と E_b^0 の中間に一つの量 E_α^0 をとり，$E_a^0 P_a^0$ と $E_b^0 P_b^0$ の項を $E_\alpha^0(P_a^0 + P_b^0)$ に置き換えることである．こうして新たに摂動のないハミルトニアンが得られ，その固有値 E_α^0 は $(g_a + g_b)$ 重に縮退している．つぎに，摂動

$$V + (E_a^0 - E_\alpha^0)P_a^0 + (E_b^0 - E_\alpha^0)P_b^0$$

が摂動のない準位 E_a^0 にもたらす補正を計算する．

パッシェン＝バック効果の取り扱い（§12）では実際上この方法が用いられる．これは場 $\mathcal{H}$ が比較的強く，そして，あるいはその結果，同じ LS 項による準位のずれが準位相互の距離にくらべて小さくなくなる場合である．このとき摂動のないハミルトニアンとして $H_C + V_1 + V_2$ の代りに $H_C + V_1$ をとる．このことは，互いに近い準位の集まり $E_{\alpha LSJ}(J = |L-S|, \cdots, L+S)$ をただ一つの準位 $E_{\alpha LS}$ に置き換えることである．こうしておいて，摂動 $V_2 + W$ がただ一つの準位 $E_{\alpha LS}$ にひき起こす補正を摂動法によって処理する．本来の意味のパッシェン＝バック法では，$\mathcal{H}$ が非常に強く，この計算の第1近似においては V_2 を無条件に無視することができる $(V_2 \ll W)$．§12 でなされたのはこれである．V_2 と W が同じ程度になるとき，この近似はもはや妥当ではなく，摂動の計算はずっと複雑になる（問題7と8）．

III. すべての次数に対する展開の具体的な式(*)

§15. ハミルトニアン H とそのレゾルベント $G(z)$ (9)

この節では，摂動による展開式をすべての次数に対して具体的につくる方法を簡単に説明する．この方法は加藤(10)によるものであり，本質的には摂動のべき級数としてハミルトニアン H のレゾルベント $G(z)$ を展開した式を利用する．この§15では，$G(z)$ の定義とその性質のうちのいくつかを説明する．

H が一つのオブザーバブルであるとき，複素変数 z の関数〔として定まる演算子〕

(*) 初めて読むときには，この節をとばしてもよい．

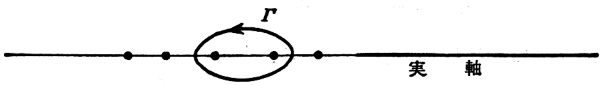
(9) 著者によっては，レゾルベントと言う代りにグリーン関数という術語を用いる．

(10) T. Kato〔加藤敏夫〕, *Prog. Theor. Phys.*, **4** (1949), 154. 加藤が特に関心をもったのは摂動法の収束条件である．彼の方法はこの問題の研究に特にうまく適合する．事実，摂動による展開は非常に多くの場合漸近展開なのである．この節では，加藤の研究のうちのこのような数学的側面には立ち入らない．

$$G(z) \equiv \frac{1}{z-H} \tag{52}$$

を H のレゾルベントであると定義する ([11]).

16•2 図は複素 z 平面を表わす．H のスペクトルは実軸の上にある．それは一般にとびとびの部分と連続な部分からなり，連続な部分はとびとびの部分より右にあって無限遠までのびている．$G(z)$ は解析関数であり，その特異点は H のスペクトルをつくる．議論を簡単にするために，スペクトルは完全にとびとびであると仮定する．



16•2図　複素 z 平面と閉曲線 Γ．H のスペクトルは実軸上に太く示されている．

固有値の列を $E_0, E_1, E_2, \cdots$ で表わし，固有値 E_i の部分空間への射影子を P_i とする．すなわち

$$HP_i = E_i P_i. \tag{53}$$

これに対して直交関係と完全性関係

$$P_i P_j = \delta_{ij} P_i \tag{54}$$

$$\sum_i P_i = 1 \tag{55}$$

([11]) ヒルベルト空間の演算子 Q に対して，一つの定数 M が存在し，どんな $|u\rangle$ についても

$$\frac{\langle u|Q^\dagger Q|u\rangle}{\langle u|u\rangle} \leqslant M$$

が成り立つとき，Q は有界であると定義する．M の下限をこの演算子の限界あるいはノルムと言い，$\|Q\|$ で表わす (*)．まったく厳密な形で，代数学と解析学のいろいろな演算のほか，特に級数の収束，微分法の概念などが，ヒルベルト空間の有界演算子に対してそのまま拡張される (M. H. Stone, *Linear Transformations in Hilbert Space*, Amer. Math. Soc., New York, 1932 を参照).

数学的見地からすれば，$G(z)$ が非常に興味をひく点は，H の固有値を除く複素 z 平面上のすべての点で有界であるということである．それは z の解析関数であり，その特異点の全体は H のスペクトルをつくる．点 z から最も近い H の固有値までの距離を $\Delta(z)$ とすれば，

$$\|G(z)\| = 1/\Delta(z)$$

が成り立つ (*).

(*) ［訳注］ 普通は，ここで定義されているノルムの平方根 ($\geqslant 0$) をノルムと言う．著者はヒルベルト空間のベクトル $|u\rangle$ に対しても $\langle u|u\rangle$ をノルムと呼んでいる（第5章，§2）から，それに合わせたのであろう（普通は $\|u\| \equiv \sqrt{\langle u|u\rangle}$ をノルムと言う）．ただし，記号 $\|Q\|$ を用いるときは普通の定義にしたがっているようである．たとえば，$\|G(z)\| = 1/\Delta(z)$ がそれである．

が成り立つ．定義 (52) により

$$G(z)P_i = \frac{P_i}{z-E_i},$$

したがって

$$G(z) = \sum_i \frac{P_i}{z-E_i}. \tag{56}$$

H のとびとびの固有値 E_i はいずれも $G(z)$ の単純な極であり，その留数は射影子 P_i である．言いかえれば，

$$P_i = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma_i} G(z)\mathrm{d}z. \tag{57}$$

ただし，Γ_i は複素平面上の閉曲線であって，点 E_i のまわりを一周するが，$G(z)$ の他の特異点はすべて Γ_i の外部にあるものとする．もっと一般に，Γ が複素平面上の閉曲線で，H の固有値を一つも通らないとし (16・2 図を参照)，この閉曲線の内部にある固有値に関する射影子 P_i の和を P_Γ とすれば，

$$P_\Gamma = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma} G(z)\mathrm{d}z. \tag{58}$$

(58) の両辺に H を掛け，等式

$$(z-H)G \equiv G(z-H) \equiv 1$$

を考慮すれば，重要な公式

$$HP_\Gamma = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma} zG(z)\mathrm{d}z \tag{59}$$

を得る．

§16. λV のべき級数による $G(z)$, P, HP の展開

ここで本来の意味の摂動問題に入る．

H と H_0 のレゾルベントはそれぞれ

$$G \equiv \frac{1}{z-H_0-\lambda V}, \qquad G_0 \equiv \frac{1}{z-H_0} \tag{60}$$

である．

$$\frac{1}{z-H_0-\lambda V} = \frac{1}{z-H_0}[(z-H_0-\lambda V)+\lambda V]\frac{1}{z-H_0-\lambda V}$$
$$= \frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0}\lambda V \frac{1}{z-H_0-\lambda V}$$

に注意する．この結果 G は整方程式

$$G = G_0(1 + \lambda VG) \tag{61}$$

の解である．

この方程式を反復法によって解けば，摂動のべき級数による G の展開

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n G_0 (VG_0)^n \tag{62}$$

が得られる [12]．

ここで，もう一度§8の記法を採用し，摂動のべき級数による P の展開を求める．λ が十分小さいときには，摂動のない固有値 E_a^0 と，$\lambda \to 0$ となる極限において E_a^0 に近づく H の（いくつかの）固有値とを同時に囲み，これらのほかには H の固有値も H_0 の固有値も囲まないような複素 z 平面上の閉曲線が確かに存在する．このような閉曲線を Γ_a で表わす．(58) により，

$$P = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma_a} G(z) \mathrm{d}z.$$

G のところに展開 (62) を代入し，加法と積分の順序を交換すれば，λ のべき級数による P の展開

$$P = P_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n A^{(n)} \tag{63}$$

が得られ，

$$A^{(n)} = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{\Gamma_a} G_0 (VG_0)^n \mathrm{d}z \tag{64}$$

である．閉曲線 Γ_a の内部で，関数 $G_0(VG_0)^n$ は E_a^0 においてだけ特異点をもち，E_a^0 は $(n+1)$ 位の極である．(64) により，$A^{(n)}$ はこの極の留数である．

この留数を計算するために，極 E_a^0 のまわりのローラン級数による G_0 の展開を利用する．この展開の係数はレゾルベントの式 (56) について容易に計算され，

$$G_0 = \frac{P_0}{z - E_a^0} + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} (z - E_a^0)^{k-1} \frac{Q_0}{a^k}$$

となる．加藤にしたがって記号 $S^k (k \geqslant 0)$ を導入し，

$$S^k = \begin{cases} -P_0 & (k = 0 \text{ のとき}) \\ \dfrac{Q_0}{a^k} & (k \geqslant 1 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{65}$$

と定めれば，上の展開はまた

---

[12] この展開の収束半径は $\|\lambda VG_0\|$ である．それゆえ，z から最も近い H_0 の固有値までの距離を $\Delta_0(z)$ とすれば，$\|\lambda V\| < \Delta_0(z)$ のときこの級数は確かに絶対収束する．

$$G_0 = \sum_{k=0}^{\infty} (-)^{k-1} (z - E_a^0)^{k-1} S^k \tag{66}$$

と書かれる．$A^{(n)}$ は $G_0(VG_0)^n$ のローラン展開における $(z-E_a^0)^{-1}$ の係数である．展開 (66) を考慮すれば，容易に

$$A^{(n)} = -\sum_{(n)} S^{k_1} V S^{k_2} V \cdots V S^{k_{n+1}} \tag{67}$$

が得られる．ここで記号 $\sum_{(p)}$ は，

$$k_1 + k_2 + \cdots + k_{n+1} = p \tag{68}$$

となるような負でない整数 $k_1, k_2, \cdots, k_{n+1}$ の組のすべてにわたって和をとることと規約する．

P の展開の係数をつくる法則を明らかにするために，その初めの数項を書けば，

$$\begin{aligned} P = P_0 &+ \lambda\left(P_0 V \frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a} V P_0\right) \\ &+ \lambda^2\left(P_0 V \frac{Q_0}{a} V \frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a} V P_0 V \frac{Q_0}{a} + \frac{Q_0}{a} V \frac{Q_0}{a} V P_0 \right. \\ &\left. - P_0 V P_0 V \frac{Q_0}{a^2} - P_0 V \frac{Q_0}{a^2} V P_0 - \frac{Q_0}{a^2} V P_0 V P_0\right) + \cdots \end{aligned} \tag{69}$$

となる．

(59) から出発して同じ計算を行なえば，HP の展開が得られ，結果は

$$(H - E_a^0) P = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n B^{(n)} \tag{70}$$

となり，

$$B^{(n)} = \sum_{(n-1)} S^{k_1} V S^{k_2} V \cdots V S^{k_{n+1}}. \tag{71}$$

この法則によれば，

$$\begin{aligned} (H - E_a^0) P = \lambda P_0 V P_0 & \\ + \lambda^2\left(P_0 V P_0 V \frac{Q_0}{a} + P_0 V \frac{Q_0}{a} V P_0 + \frac{Q_0}{a} V P_0 V P_0\right) &+ \cdots \end{aligned} \tag{72}$$

が得られる．

§17. 固有値と固有状態の計算

H の固有値と固有ベクトルのうち，われわれが求めているのは，射影子として P をもつ空間 $\mathcal{E}$ における演算子 HP の固有値〔と固有ベクトル〕である．P と HP のつくり方はわかったから，われわれの問題は g_a 次元空間における一つの行列の対角化問題に帰着する．

縮退がない場合：$g_a = 1$.

このとき，H の固有ベクトルは $P|0\rangle$ である．そのノルム $\langle 0|P|0\rangle$ の展開は演算子 P の展開から容易に導き出される．$P|0\rangle$ は第 I 節でつくられた固有ベクトル〔条件 (3), (4) を満たす $|\psi\rangle$〕のスカラー倍である．後者のノルムが $1/\langle 0|P|0\rangle$ であることはすぐに示される．

固有エネルギー E_a は式 $HP = E_a P$ によって与えられる．$\mathrm{Tr}\,P = \mathrm{Tr}\,P_0 = 1$ であるから，

$$E_a = \mathrm{Tr}\,HP = E_a^0 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n (\mathrm{Tr}\,B^{(n)})$$

(式 (70))，すなわち

$$\varepsilon_n = \mathrm{Tr}\,B^{(n)} \tag{73}$$

となる．$B^{(n)}$ のなかに現われる項はいずれも P_0 を少なくとも一つ含み，よく知られた跡の性質により $\mathrm{Tr}(MP_0N) = \mathrm{Tr}(P_0NM) = \langle 0|NM|0\rangle$ が成り立つから，摂動のない状態 $|0\rangle$ における演算子の平均値という形で ε_n を表わすことは容易である．特に E_a の展開における初めの数項をとれば，第 I 節の結果（式 (12) と (26)）と一致し，

$$E_a = E_a^0 + \lambda\langle 0|V|0\rangle + \lambda^2\left\langle 0\left|V\frac{Q_0}{a}V\right|0\right\rangle$$
$$+ \lambda^3\left(\left\langle 0\left|V\frac{Q_0}{a}V\frac{Q_0}{a}V\right|0\right\rangle - \left\langle 0\left|V\frac{Q_0}{a^2}V\right|0\right\rangle\langle 0|V|0\rangle\right) + \cdots \tag{74}$$

を得る．

縮退のある場合：$g_a \neq 1$.

HP の固有値問題を $\mathcal{E}_a$ において直接に解く代りに，むしろこの問題を $\mathcal{E}_a^0$ における類似の対角化問題に置き換えることができる．

$\mathcal{E}_a$ の任意のベクトルは，$\mathcal{E}_a^0$ のあるはっきり決まったベクトルから $\mathcal{E}_a$ への射影によって得られるとする（このことは縮退のない場合にも暗に仮定されている）．$\mathcal{E}_a$ と $\mathcal{E}_a^0$ とは同じ次元数をもつから，この仮定により射影子 P は $\mathcal{E}_a$ のベクトルと $\mathcal{E}_a^0$ のベクトルとのあいだに一対一の対応をつける．このことからまた，射影子 P_0 も $\mathcal{E}_a$ のベクトルと $\mathcal{E}_a^0$ のベクトルとのあいだに一対一の対応をつけることが導かれる．二つの部分空間に関するこの《非直交》条件は，λ が十分小さいとき明らかに満たされる．

このとき，$\mathcal{E}_a$ にある H の任意の固有ベクトルは $P|E_a^0\alpha\rangle$ という形に表わされ，方程式

$$HP|E_a^0\alpha\rangle = E_aP|E_a^0\alpha\rangle$$

を満たす．ところが $\mathcal{E}_a$ のベクトルのあいだでこの等式が成り立つためには，これらが $\mathcal{E}_a^0$

の上で同じ射影をもつことが必要十分である．すなわち

$$P_0HP|E_a^0\alpha\rangle = E_\alpha P_0P|E_a^0\alpha\rangle.$$

いま

$$H_a = P_0HPP_0, \quad K_a = P_0PP_0 \tag{75}$$

と置けば，上の式は

$$H_a|E_a^0\alpha\rangle = E_\alpha K_a|E_a^0\alpha\rangle \tag{76}$$

と書かれる．

K_a は空間 $\mathcal{E}_a^0$ で定められたエルミート演算子，H_a も同じ空間のエルミート演算子である．(76) は一般化された固有値方程式である．固有値 E_α は永年方程式（第7章，§17を参照）

$$\det(H_a - xK_a) = 0$$

の解である．これが求める固有エネルギーである．対応する固有ベクトル $|E_a^0\alpha\rangle$ を $\mathcal{E}_a$ へ射影すれば H の固有ベクトルとなる．

H_a と K_a の展開はそれぞれ HP と P の展開から容易に導かれる（式 (69) と (72)）．すなわち

$$K_a = P_0 - \lambda^2 P_0 V\frac{Q_0}{a^2}VP_0 + \cdots \tag{77}$$

$$H_a = E_a^0K_a + \lambda P_0VP_0 + \lambda^2 P_0V\frac{Q_0}{a}VP_0 + \cdots. \tag{78}$$

近似の次数を決めておいて固有値 E_α を求めるには，H_a と K_a の展開をその次数で打ち切ればよい．

第 n 近似までとるとき，この方法によって得られる結果は第II節の基礎理論による結果と場合によって異なるけれども，その差は高位の無限小である．第1近似では，二つの方法の結果は厳密に同じである．比較に当たっては，ベクトル $|E_a^0\alpha\rangle$ が基礎理論のベクトル $|0\rangle$ と異なることに十分注意しなければならない．$\lambda\to 0$ のとき $|E_a^0\alpha\rangle$ は $|0\rangle$ に収束する．

加藤の方法にきわめて近いけれども，さらに簡単な展開をもたらす方法がブロック [18] によって与えられた．この方法は，

$$PP_0 \equiv \mathcal{U}K_a, \qquad \mathcal{U}P_0 = \mathcal{U} \tag{79}$$

によって定義される演算子 $\mathcal{U}$ が特に簡単な形に展開されるという事実に基づいている．すなわち

[18] C. Bloch, *Nuclear Physics*, **6**, (1958) 329.

$$\mathcal{U} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \mathcal{U}^{(n)} \tag{80}$$

$$\mathcal{U}^{(n)} = \sum_{(n)}{}' S^{k_1} V S^{k_2} V \cdots V S^{k_n} V P_0. \tag{81}$$

ただし，$\sum_{(n)}'$ は条件

$$\left.\begin{aligned} &k_1 + k_2 + \cdots + k_p \geqslant p \qquad (p = 1, 2, \cdots, n-1) \\ &k_1 + k_2 + \cdots + k_n = n \end{aligned}\right. \tag{82}$$

を満たす0または正の整数の組 $k_1, k_2, \cdots, k_n$ の全部にわたって加えることを表わす．$P_0\mathcal{U} = P_0$ と $P\mathcal{U} = \mathcal{U}$ に注意する．$\mathcal{E}_a^0$ のベクトルに $\mathcal{U}$ を作用させると，$\mathcal{E}_a$ のベクトルが与えられ，これを $\mathcal{E}_a^0$ に射影するともとのベクトルになる．

$\mathcal{U}$ の定義により，方程式 (76) は

$$(P_0 H \mathcal{U} - E_a) K_a | E_a^0 \alpha \rangle = 0 \tag{83}$$

に同値である．この方程式はブロックの方法において，加藤の方法における方程式 (76) の役割を演じる．これは空間 $\mathcal{E}_a^0$ における<u>エルミートでない</u>演算子 $P_0 H \mathcal{U} \equiv H_a K_a^{-1}$ に対する普通の固有値方程式である [14]．この固有値が求める固有エネルギーである．対応する固有ベクトル $K_a | E_a^0 \alpha \rangle$ について言えば，これは H の固有ベクトルの $\mathcal{E}_a^0$ への射影であるから，これに演算子 $\mathcal{U}$ を施すことにより H の固有ベクトルが導かれる．$P_0 H \mathcal{U}$ の展開は，

$$P_0 H \mathcal{U} = E_a^0 P_0 + \lambda P_0 V \mathcal{U}$$

に注意すれば，$\mathcal{U}$ の展開から容易に導かれる．その初めの数項を書けば，

$$P_0 H \mathcal{U} = E_a^0 P_0 + \lambda P_0 V P_0 + \lambda^2 P_0 V \frac{Q_0}{a} V P_0 + \cdots$$

となる．これは H_a と K_a の展開（式 (77) と (78)）より簡単であることがわかる．

摂動のない場合には，エネルギー E_a は簡単な公式

$$E_a = \langle 0 | H \mathcal{U} | 0 \rangle$$

によって与えられる．これから E_a の展開における各係数

$$\varepsilon_n = \sum_{(n-1)}{}' \langle 0 | V S^{k_1} V S^{k_2} V \cdots V S^{k_n} V | 0 \rangle$$

がただちに導かれる．

---

[14] 空間 $\mathcal{E}_a^0$ の演算子とみなせば，K_a は逆をもつ．全ヒルベルト空間の演算子としては，明らかに逆をもたない．

演 習 と 問 題

1. ハミルトニアン $(p^2+m^2\omega^2q^2)/2m$ に相互作用 $V(q)$ を付け加える.

a) $V=\dfrac{1}{2}m\alpha^2q^2$

b) $V=bq$

の二つの場合について，エネルギー準位のずれを摂動の理論によって計算し，まず第1近似を，ついで第2近似を求めよ．これら二つの場合には，このずれは厳密に計算される．厳密な結果を摂動論による結果と比較せよ．

2. シュレーディンガー理論によって水素原子を考える（第11章）．一定の電場 $\mathcal{E}$（相互作用は $-e\mathcal{E}\cdot\boldsymbol{r}$）は，各準位の縮退をどの程度まで取り除くことができるか．第1次補正によって準位 $n=2$ は三つの等距離の準位に分かれる（相互の距離は $3\mathcal{E}\hbar^2/me$）ことを示し，それらの一つ一つについて縮退の位数を与えよ．

3. 中心力場による近似においては，閉殻をつくる電子群の全角運動量，全軌道角運動量，全スピンが0であることを示せ．このことから，与えられた電子配置に対するベクトル (LSM_LM_S) のうち線形独立なものの個数は，閉殻をつくる電子だけを考えに入れて得られる個数と同じであることを導け．

4. jj 結合における炭素原子の基底配置のスペクトル項はどうなるか．jj 結合でも LS 結合でも（§11）全角運動量 J については，同じ値と同じ重複度が得られることを確かめよ．この理由を説明せよ．

5. 窒素原子 $(Z=7)$ は基底配置 $1s^2 2s^2 2p^3$ をもつ．LS 結合において，異なるスペクトル項は何か．

6. §13の考察を§9, 10, 11の複雑な原子の研究に適用せよ．H_C, V_1, V_2 の対称性をもう一度確かめ，a) LS 結合の場合と b) jj 結合の場合につき，摂動 $V_i(i=1,2)$ をつぎつぎに導入することによって，H_C の準位の縮退がどのように，またどの程度まで除かれるかを示せ．

7. ナトリウム原子 $(Z=11)$ の基底配置は $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$，最初の励起配置は $1s^2 2s^2 2p^6 3p^1$ である．したがって，ナトリウムの基底状態は ${}^2S_{1/2}$ 状態，最初の二つの励起状態は ${}^2P_{1/2}$ と ${}^2P_{3/2}$ である．これらの準位に対する一定の磁場 $\mathcal{H}$ の効果を調べよ．それぞれについてランデ因子を計算せよ．$\mathcal{H}$ の強さをゼーマン領域からパッシェン＝バック領域までだんだん増してゆく．μ_B はボーア磁子，A は§11で導入したスピン－軌道相互作用の定数 $(A>0)$ であるとし，パラメータ $\rho=\mu_B\mathcal{H}/A\hbar^2$ の関数として ${}^2P$ 準位を表わす式を求めよ．このグラフを書け．

8. 前問と同じ問題を，炭素原子の基底項 $({}^3P)$ について考えよ［準位は永年方程式の解として与えられ，そのうちの一つは3次である；グラフのおおよその挙動を決定するためには，これらの永年方程式を解くことを必要としない］．

9. g_α 重に縮退した一つの準位から，摂動 V の導入によって異なる準位 $E_1, E_2, \cdots, E_n$ が得られるとき，これらはそれぞれ

$$\langle E\rangle=\frac{1}{g_a}\sum_{i=1}^{n}g_iE_i,\qquad (\varDelta E)^2=\frac{1}{g_a}\sum_{i=1}^{n}g_i(E_i-\langle E\rangle)^2$$

によって定義される重心 $\langle E\rangle$ と標準偏差 $\varDelta E$ によって特徴づけられる（記号は§8と同じ）．V に関して1次までとるとき，

$$\varepsilon\equiv\langle E\rangle-E_a^0\simeq\frac{1}{g_a}\mathrm{Tr}\,P_0V,\qquad (\varDelta E)^2\simeq\frac{1}{g_a}\mathrm{Tr}\,P_0(V-\varepsilon)P_0(V-\varepsilon)$$

が成り立つことを示せ．この公式を前二問の摂動

$$V=A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})+\frac{e\hbar}{2mc}\mathcal{H}\cdot(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S})$$

に適用せよ．この場合には $\varepsilon=0$ であることを示し，$\varDelta E$ を表わす式を求め，問題7で定義したパラメータ ρ の関数として，$\varDelta E$ の変動を調べよ．

第17章　時間を含むシュレーディンガー方程式の近似解

§1.　表示の変更とハミルトニアンの一部分を摂動として取り扱うこと

この章は二つの節から成り，時間を含むシュレーディンガー方程式の近似解法に当てられる．われわれの調べている量子系が時刻 t_0 においてある力学的状態にあることを知って，時刻 t における力学的状態を決定するという問題である．それゆえ本質的にこの問題は，シュレーディンガー表示において力学的状態の時間的な変化を定める演算子 $U(t, t_0)$ をできるだけ正確に決定することである．

$U(t, t_0)$ の主な性質を簡単に復習する．系のハミルトニアン $H(t)$ を与えると，この演算子ははっきり決められる．それは積分方程式

$$U(t, t_0) = 1 - \mathrm{i}\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} H(\tau)\,U(\tau, t_0)\,\mathrm{d}\tau \tag{1}$$

あるいは同じことであるが，シュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = H(t)\,U(t, t_0) \tag{2}$$

と初期条件

$$U(t_0, t_0) = 1 \tag{3}$$

によって定められる．$H(t)$ はエルミートであるから U はユニタリである．すなわち

$$U(t, t')\,U^{\dagger}(t, t') = U^{\dagger}(t, t')\,U(t, t') = 1. \tag{4}$$

さらに，合成の法則

$$U(t, t') = U(t, t'')\,U(t'', t') \tag{5}$$

が成り立つ[1]．これから

$$U^{\dagger}(t, t') = U(t', t) \tag{6}$$

が導かれる．(1) の両辺のエルミート共役をとって得られる式も，U の定義として同値である．性質 (6) を考えに入れると，この式は

---

[1] この法則の物理的意味は明らかであるが，これを証明するには，V がユニタリで時間を含まないとき，$U(t, t'')V$ がシュレーディンガー方程式 (2) の解であることに注意する．任意の時刻 t においてこれが $U(t, t')$ に等しいためには，t のある特殊な値，たとえば $t = t''$ において等しければよい．このことから $V = U(t'', t')$ を得る．

$$U(t,t_0)=1-\mathrm{i}\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}U(t,\tau)H(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{7}$$

の形に書き表わされる．

この章で述べる方法はつぎのような筋道に沿って進められる．ハミルトニアン H は

$$H(t)\equiv H^{(0)}(t)+V(t) \tag{8}$$

の形に書き表わされ，$H^{(0)}(t)$ はあるシュレーディンガー方程式のハミルトニアンであり，この方程式は積分できるものとする．$H^{(0)}$ に対応する時間的変化の演算子を $U^{(0)}(t,t_0)$ とする．すなわち

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U^{(0)}(t,t_0)=H^{(0)}(t)U^{(0)}(t,t_0),\qquad U^{(0)}(t_0,t_0)=1. \tag{9}$$

$U^{(0)}(t,t_0)$ のつくり方はわかっているのであるから，U を決めるためにはユニタリ演算子

$$U_I(t,t_0)\equiv U^{(0)\dagger}(t,t_0)U(t,t_0) \tag{10}$$

をつくればよい．U_I の物理的意味についてはすでに第8章 §14 で述べた．すなわち U_I はシュレーディンガー表示からユニタリ変換 $U^{(0)\dagger}(t,t_0)$ によって導き出された中間表示における状態の時間的変化の演算子である．第8章 §14 で詳しく説明した簡単な計算によれば，t の関数として U_I はハミルトニアン

$$V_I(t)\equiv U^{(0)\dagger}(t,t_0)V(t)U^{(0)}(t,t_0) \tag{11}$$

にしたがって変化する．言いかえると，$U_I(t,t_0)$ は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_I(t,t_0)=V_I(t)U_I(t,t_0),\qquad U_I(t_0,t_0)=1, \tag{12}$$

あるいは同じことであるが，

$$U_I(t,t_0)=1-\mathrm{i}\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}V_I(\tau)U_I(\tau,t_0)\mathrm{d}\tau \tag{13}$$

によって定められる．また，U_I は時間的変化の演算子がもつ性質をすべて備え，特に (1)－(7) のなかの $H(t)$ を $V_I(t)$ に替えさえすれば，これらの等式をすべて満たす．

積分方程式 (1)，(7)，(13) は，反復法によって少なくとも形式的には解くことができる．たとえば (13) の右辺の積分のなかにある $U_I(\tau,t_0)$ のところに，これを表わす式

$$1-\mathrm{i}\hbar^{-1}\int_{t_0}^{\tau}V_I(\tau')U_I(\tau',t_0)\mathrm{d}\tau'$$

を代入すれば，

$$U_I(t,t_0)=1-\mathrm{i}\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}V_I(\tau)\mathrm{d}\tau+(\mathrm{i}\hbar)^{-2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\int_{t_0}^{\tau}\mathrm{d}\tau'\,V_I(\tau)V_I(\tau')U(\tau',t_0) \tag{14}$$

となる．ひきつづき同じことを繰り返せば，展開

$$U_I(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}U_I^{(n)}(t,t_0) \tag{15}$$

が得られ，$U_I^{(n)}$ はつぎの積分になる：

$$U_I^{(n)}\equiv(\mathrm{i}\hbar)^{-n}\int_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\cdots>\tau_1>t_0}\mathrm{d}\tau_n\mathrm{d}\tau_{n-1}\cdots\mathrm{d}\tau_1 V_I(\tau_n)V_I(\tau_{n-1})\cdots V_I(\tau_1). \tag{16}$$

定義 (10) と (11) を考えに入れると，これから U の展開が導き出される．すなわち

$$U(t,t_0)=U^{(0)}(t,t_0)+\sum_{n=1}^{\infty}U^{(n)}(t,t_0) \tag{17}$$

$$U^{(n)}(t,t_0)=(\mathrm{i}\hbar)^{-n}\int_{t>\tau_n>\tau_{n-1}>\cdots>\tau_1>t_0}\mathrm{d}\tau_n\mathrm{d}\tau_{n-1}\cdots\mathrm{d}\tau_1 U^{(0)}(t,\tau_n)V(\tau_n)$$
$$\times U^{(0)}(\tau_n,\tau_{n-1})V(\tau_{n-1})\cdots U^{(0)}(\tau_2,\tau_1)V(\tau_1)U^{(0)}(\tau_1,t_0). \tag{18}$$

展開 (15)，(17) は V のべき級数による展開であり，$U^{(0)}(t,t_0)$ と $U(t,t_0)$ の違いが小さいほど速く収束する．これらの展開が本章で明らかにされる計算法の出発点である．$U^{(0)}$ は第0近似を表わし，$U^{(1)},U^{(2)},\cdots,U^{(n)},\cdots$ はこの近似に対する第1次，第2次，…，第 n 次，… の補正を表わす．実際には，次数が大きくなるにつれてこれらの補正の計算は急速に複雑さを増すので，たいていの場合は最も低い次数の補正だけをとる．

I．時間を含む摂動の理論

§2．遷移確率の定義と摂動による計算

上記の方法は特別な場合として $H^{(0)}$ が時間を含まない場合にも適用される．この場合には時間的変化の演算子 $U^{(0)}(t,t')$ が簡単に

$$U^{(0)}(t,t')=\exp[-\mathrm{i}H^{(0)}(t-t')/\hbar] \tag{19}$$

と書かれる．$H^{(0)}$ の固有値問題は解かれているとしよう．特に断わらない限り，そのスペクトルは完全にとびとびであると仮定するが，これは表記法を簡単にするためであり，本質的な制限ではない．$H^{(0)}$ を対角型にする一つの表現において，$V(t)$ はその行列要素によって与えられているとする．今後は，この表現の基底ベクトルの完全列を $|a\rangle,|b\rangle,\cdots,|k\rangle,\cdots$ で表わし，これらに対応する $H^{(0)}$ の固有値を $E_a^0,E_b^0,\cdots,E_k^0,\cdots$ とする．われわれはまた，記号

$$\omega_{kl}=(E_k^0-E_l^0)/\hbar \tag{20}$$

$$V_{kl}(t)=\langle k|V(t)|l\rangle \tag{21}$$

を使う．ω_{kl} は遷移 $l\to k$ に対する《ボーア振動数》であり，$V_{kl}(t)$ は同じ遷移に対応する $V(t)$ の行列要素である．

さて，初期時刻 t_0 において，系が $H^{(0)}$ の固有状態の一つ，たとえば状態 a にあるとする．たまたま時刻 t において測定が行なわれるとし，このとき系が $H^{(0)}$ の別の固有状態，たとえば状態 b に見いだされる確率を計算してみよう．この大きさを $W_{a\to b}$ とし，a から b への遷移確率と定義する．すなわち

$$W_{a\to b} = |\langle b|U(t,t_0)|a\rangle|^2 \tag{22}$$

である．

V が0ならば，時刻 t において系の状態を表わすベクトルは，初期状態を表わすベクトル $|a\rangle$ と因数 $\exp[-\mathrm{i}E_a^0(t-t_0)/\hbar]$ だけしか違わないから，$W_{a\to b}$ は0である．$U(t,t_0)$ に展開 (17) を代入すれば，確率振幅 $\langle b|U(t,t_0)|a\rangle$ を V のべき級数として展開できる．すなわち

$$\langle b|U(t,t_0)|a\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\langle b|U^{(n)}|a\rangle. \tag{23}$$

$U^{(n)}$ を表わす式は (18) によって与えられる．

さきに定めた表現 $\{H^{(0)}\}$ において，振幅に対する各次数の寄与を書けば，

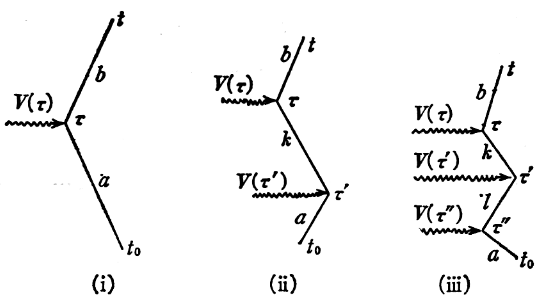
$$\langle b|U^{(1)}|a\rangle = -\mathrm{i}\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\,[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_b^0(t-\tau)/\hbar}V_{ba}(\tau)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_a^0(\tau-t_0)/\hbar}] \tag{24^1}$$

$$\langle b|U^{(2)}|a\rangle = (\mathrm{i}\hbar)^{-2}\sum_k\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\int_{t_0}^{\tau}\mathrm{d}\tau'[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_b^0(t-\tau)/\hbar}V_{bk}(\tau)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_k^0(\tau-\tau')/\hbar} \times V_{ka}(\tau')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_a^0(\tau'-t_0)/\hbar}] \tag{24^2}$$

$$\langle b|U^{(3)}|a\rangle = (\mathrm{i}\hbar)^{-3}\sum_k\sum_l\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\int_{t_0}^{\tau}\mathrm{d}\tau'\int_{t_0}^{\tau'}\mathrm{d}\tau''[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_b^0(t-\tau)/\hbar}V_{bk}(\tau) \times \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_k^0(\tau-\tau')/\hbar}V_{kl}(\tau')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_l^0(\tau'-\tau'')/\hbar}V_{la}(\tau'')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_a^0(\tau''-t_0)/\hbar}]. \tag{24^3}$$

これらのすべての式において，和は $\{H^{(0)}\}$ の基底ベクトル全体にわたってとられる．

17・1図のダイアグラムを使って，これら各次数の寄与を図式的に表わすことができる．



17・1図　a から b への遷移確率の振幅に対する各次数の寄与を表わすダイアグラム．(i)第1次，(ii)第2次，(iii)第3次．

ダイアグラム (i) は第1次の寄与，もっと正確に言えば (24^1) の右辺の括弧のなかにある積を表わす．実線によって系の時間的変化が与えられる．t_0 から τ までのあいだ，系は摂動のないハミルトニアン $H^{(0)}$ によって支配され，その結果状態 a にとどまり，その状態ベクトルにはただ因数 $\exp[-iE_a^0(\tau-t_0)/\hbar]$ が掛けられるだけである．時刻 τ において，摂動 $V(\tau)$ によって状態は a から b に移り，そのとき遷移の行列要素 $V_{ba}(\tau)$ が与えられる．時刻 τ から t までのあいだ，系はふたたび $H^{(0)}$ にしたがって変化するから，状態 b にとどまり，その結果因数 $\exp[-iE_b^0(t-\tau)/\hbar]$ が掛けられる．このようにダイアグラムを下から上にたどれば，括弧のなかにある三つの因数が右から左へ並んだ順に与えられる．こうして得られた積を τ について積分すれば第1次の寄与が得られる．

同じようにダイアグラム (ii) は第2次の寄与を表わす．t_0 から τ' まで系は $H^{(0)}$ にしたがって変化し，$V(\tau')$ の効果により初めの状態 a から中間の状態 k に移り，τ' から τ まで $H^{(0)}$ にしたがって変化し，$V(\tau)$ の効果により状態 k から終りの状態 b に移り，最後は τ から t まで $H^{(0)}$ にしたがって変化する．こうして (24^2) の右辺の括弧のなかにある五つの因数が右から左へ並んだ順に得られる．これを τ' と $\tau(t_0<\tau'<\tau<t)$ について積分し，さらにすべての中間状態について加えれば，第2次の寄与が得られる．第2次遷移の時間的展開がこのように表わされることを考えに入れて，しばしば状態 k を仮りの状態と呼び，実の状態 a, b と区別する．そして第2次遷移は仮りの状態を媒介にして行なわれると言う．

同様にして，第3次遷移は二つの仮りの状態 k と l を媒介にして行なわれ，ダイアグラム (iii) によって表わされる．そこには摂動ポテンシャルが時刻 τ'', τ', τ の順に前後3回介入し，系を a から l に，l から k に，ついで k から b に移す．同様に，第 n 次遷移は $(n-1)$ 個の仮りの状態を媒介にして行なわれる．

展開 (23) を第 n 項で打ち切って得られる量は，求める確率振幅を n 次の精度で表わす．その絶対値の二乗を n 次の遷移確率と定義する [2]．すなわち，

$$W_{a\to b}\simeq|\langle b|U^{(1)}|a\rangle+\langle b|U^{(2)}|a\rangle+\cdots+\langle b|U^{(n)}|a\rangle|^2.$$

特に，1次の遷移確率は式

$$W_{a\to b}\simeq|\langle b|U^{(1)}|a\rangle|^2=\hbar^{-2}\left|\int_{t_0}^{t}e^{i\omega_{ba}\tau}V_{ba}(\tau)d\tau\right|^2 \tag{25}$$

によって与えられる．この近似において

$$W_{b\to a}\simeq W_{a\to b}$$

---

[2] こうして得られた式は V のべきによる $W_{a\to b}$ の展開を少なくとも $(n+1)$ 次まで正確に表わす．もし $\langle b|U^{(1)}|a\rangle=0$ ならば，$(n+1)$ 次より高い精度が得られる．

であることに注意する．この関係は高い次数の近似においては一般に成り立たなくなる．またこれを微視的可逆性すなわち $W_{Kb\to Ka} = W_{a\to b}$ と混同してはならない．後者はハミルトニアンが時間反転によって不変であるときにだけ満たされるものであり，またその場合には，任意の次数まで厳密に成り立つ関係である（第15章 §20）．

§3.　核のクーロン励起に関する半古典理論

応用例として，荷電粒子，たとえば陽子による核のクーロン励起という問題を考えよう (3).

等速陽子のビームが核の標的に衝突すると考える．衝突の過程で各標的核は場合により基底状態 α から励起状態の一つ β への遷移 (*) を行なう．この核反応の断面積を計算してみよう．

核の電荷を Ze, 半径を R, 状態 α と β のスピンをそれぞれ J_α と J_β, エネルギーをそれぞれ E_α と E_β で表わす．実際には $(2J_\alpha+1)$ 個の線形独立な α 状態があり，それらは与えられた量子化軸 (**) の方向のスピンの成分 M_α によって互いに区別され，それぞれベクトル $|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$ によって表わされる．核のハミルトニアンを H_N とすれば，

$$H_N|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle \qquad (M_\alpha = -J_\alpha, \cdots, J_\alpha)$$

が成り立つ．同様に

$$H_N|\beta J_\beta M_\beta\rangle = E_\beta|\beta J_\beta M_\beta\rangle \qquad (M_\beta = -J_\beta, \cdots, J_\beta).$$

陽子－核を合わせた集合の重心系における入射エネルギーを $E = Mv^2/2$, 核の励起エネルギーを $\varDelta E = E_\beta - E_\alpha$, 入射陽子の方向を Ω_α, 非弾性散乱を受けた陽子の方向を Ω_β, これら二つの方向がつくる角を θ とする．計算したい大きさは，陽子が Ω_β 方向へ非弾性的に散乱され，そのあいだに核が $(\alpha J_\alpha M_\alpha)$ 状態から $(\beta J_\beta M_\beta)$ 状態へ移る過程の断面積

$$\mathrm{d}\sigma(\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta)/\mathrm{d}\Omega$$

である．

---

(3) クーロン励起と，核の構造の研究に対するその応用に関しては，ALDER et al., *Rev. Mod. Phys.*, **22** (1956), 432 を参照．ここで述べる半古典的取り扱いは K. A. TER-MARTYROSIAN, *J. Exptl. Theoret. Phys. URSS*, **28** (1952), 284 による．

(*) ［訳注］ 原子核物理学では遷移と言わずに転移と言うのが普通であるが，どちらも原語は同じ transition なので，本書では統一上“遷移”と訳しておく．

(**) ［訳注］ 第13章で示してあるように，角運動量を表わすには，その大きさの二乗 J^2 と，それの成分のひとつ J_z との同時固有状態を基底にとるのが普通である（第2巻112頁の §6を参照）．成分としては z 成分をとることが多いが，必ずしもその必要はなく，別の軸でもよい．とにかくそのように選んだ軸のことを，（角運動量の）“量子化軸”と呼んでいる．

陽子－核相互作用を調べよう．核の重心から入射陽子までの距離 $\boldsymbol{r}$ がごく大きい（$r \gg R$）ときそれは純クーロン相互作用 Ze^2/r だけであるが，r が減少するにつれてだんだんこれからずれてゆく．$r > R$ である限り，ずれは純粋に電磁的な原因によるものであり，本質的には厳密なクーロン相互作用と項 Ze^2/r との差，すなわち

$$V = e^2 \sum_{i=1}^{Z} \left(\frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|} - \frac{1}{r} \right) \tag{26}$$

にまとめられる（$\boldsymbol{r}_i$ は核の i 番目の陽子の位置ベクトル）．

陽子が核のなかに《侵入》する（$r < R$）ときには，本来の意味の核相互作用が働きはじめ，電磁相互作用よりはるかに大きくなる．

エネルギー E が十分低いならば，クーロン斥力ポテンシャル Ze^2/r は陽子が核に近づくことを妨げ，その結果，衝突が行なわれる過程を通じてつねに支配的な相互作用として働く．このとき陽子－核の運動は第1近似としてハミルトニアン

$$H^{(0)} \equiv H_N + \left(\frac{p^2}{2M} + \frac{Ze^2}{r} \right)$$

にしたがう．ここで $p^2/2M$ は陽子の運動エネルギーである．陽子の運動は核の運動から完全に分離される．核は基底状態にとどまり，陽子は完全弾性散乱を受け，その微分断面積はラザフォードの公式（第6章（29））

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{1}{4} a^2 \sin^{-4} \frac{1}{2}\theta$$

によって与えられる．a は古典運動における最接近距離の半分である．すなわち

$$a = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{E}. \tag{27}$$

上に述べた近似は

$$a \gg R \tag{28}$$

である限り正しい．われわれはこの他に，

$$\frac{\Delta E}{E} \ll 1 \tag{29}$$

$$\gamma \gg 1 \tag{30}$$

ただし

$$\gamma \equiv \frac{a}{\lambda\!\!\!^{-}} = \frac{Ze^2}{\hbar v} \tag{31}$$

と仮定する．

陽子－核相互作用の Ze^2/r からのずれによって非弾性衝突が生じる．しかし条件（28）により，陽子は事実上核のなかに《侵入》しないから，これらのずれは本質的にただ一つ

の項 V にまとめられる．このとき，条件 (30) によりクーロン散乱の古典的な取り扱い（第6章，§5）を考えることができる．陽子の運動は波束の運動であるが，その大きさは無視され，その中心 $\boldsymbol{r}(t)$ は対応する古典運動法則にしたがう．与えられた非弾性衝突 $(\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta)$ においても陽子の運動を古典的な仕方で取り扱うことができる．ポテンシャル V を無視し，またその結果として，衝突の過程で陽子から核へ移されるエネルギー ΔE を無視すれば，古典運動方程式の解はよく知られており，条件 (29) が満たされるとき近似は十分に正当である．こうして陽子のたどる軌道 $\boldsymbol{r}(t)$ が定められると，V は<u>時間を含む摂動</u>

$$V(t) = e^2 \sum_{i=1}^{Z} \left[\frac{1}{|\boldsymbol{r}(t) - \boldsymbol{r}_i|} - \frac{1}{r(t)} \right]$$

として核の力学変数に作用し，これによって遷移 $(\alpha J_\alpha M_\alpha) \to (\beta J_\beta M_\beta)$ が引き起こされる．遷移確率 $W_{\alpha\to\beta}$ は小さい（$W_{\alpha\to\beta} \ll 1$ が経験的に確かめられる）から，第1近似で足りる．公式 (25) により，

$$W_{\alpha\to\beta} = \hbar^{-2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Delta E)t/\hbar} \langle \beta J_\beta M_\beta | V(t) | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle \mathrm{d}t \right|^2 \tag{32}$$

を得る．求める断面積はこの確率とラザフォードの断面積との積である．すなわち

$$\mathrm{d}\sigma(\Omega_\alpha M_\alpha \to \Omega_\beta M_\beta) = \frac{1}{4} a^2 \sin^{-4} \frac{1}{2}\theta \; W_{\alpha\to\beta} \mathrm{d}\Omega. \tag{33}$$

残ったのは $W_{\alpha\to\beta}$ の計算である．ここではこの計算の大筋を述べるだけにしておく．$\boldsymbol{r}_i$ と $\boldsymbol{r}(t)$ の極座標をそれぞれ (r_i, Ω_i) と (r, Ω) で表わす．あとの方は t の関数としてはっきり決まっている．$|\boldsymbol{r}(t) - \boldsymbol{r}_i|^{-1}$ を球面調和関数によって展開すると（付録 B (99)），

$$V(t) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} (-)^m Q_l^m T_l^{-m}, \tag{34}$$

ただし

$$Q_l^m = \sum_{i=1}^{Z} e r_i^l Y_l^m(\Omega_i) \tag{35}$$

$$T_l^m(t) = \frac{4\pi e}{2l+1} \frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}} \tag{36}$$

となる．この展開は $r_i < r$ のときしか成り立たないが，陽子は核のなかに《侵入》しないから，この条件はつねに満たされる．(32) に代入すれば，

$$W_{\alpha\to\beta} = \left| \sum_{lm} (-)^m S_l^{-m} \langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle \right|^2 \tag{37}$$

$$S_l^m = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Delta E)t/\hbar} T_l^m(t) \mathrm{d}t/\hbar \tag{38}$$

が得られる．

係数 S_l^m は陽子がたどる軌道だけによって決まり，数値積分によって求められる．

$(2l+1)$ 個の演算子 $Q_l^m (m=-l, \cdots, +l)$ は電気 2^l 重極モーメント $\boldsymbol{Q}^{(l)}$ の標準成分である（第13章，§33を参照）．それゆえ (37) のなかに現われる行列要素のうち 0 でないものは，角運動量の選択規則と偶奇性の規則

$$|J_\alpha - J_\beta| \leqslant l \leqslant J_\alpha + J_\beta, \qquad m = M_\beta - M_\alpha, \qquad \Pi_\alpha \Pi_\beta = (-)^l \tag{39}$$

を満たすものに限られる（Π_α, Π_β はそれぞれ状態 α, β の偶奇性である）．さらに，ウィグナー＝エッカルトの定理によれば，

$$\langle \beta J_\beta M_\beta | Q_l^m | \alpha J_\alpha M_\alpha \rangle = (2J_\beta+1)^{-1/2} \langle J_\alpha l M_\alpha m | J_\alpha M_\beta \rangle \langle \beta \| \boldsymbol{Q}^{(l)} \| \alpha \rangle.$$

選択規則 (39) により，(37) に現われる和は，偶奇性のはっきり決まった有限個の l の値と，ただ一つの m の値に限られる．さらに，粗い評価によって，すべてのことが同じならば，寄与《$l+2$》は寄与《l》の約 $(R/a)^2$ 倍であることが示される．それゆえ，選択規則に適する範囲で最も小さい l の値，すなわち $|J_\alpha - J_\beta|$ または $|J_\alpha - J_\beta|+1$ に対する項だけを残すことができる．このような l の値を l_0 とすれば，

$$W_{\alpha\to\beta} \simeq \frac{\langle J_\alpha l_0 M_\alpha m | J_\beta M_\beta \rangle^2}{2J_\beta+1} |S_{l_0}^{-m}|^2 |\langle \beta \| \boldsymbol{Q}^{(l_0)} \| \alpha \rangle|^2 \qquad (m = M_\beta - M_\alpha)$$

となる．この式を (33) に代入すれば断面積の理論式が得られ，これを実験と対照することができる．

標的核のスピンの方向がそろえられておらず，励起された核の偏りを観測しない実験においてわれわれが観測する断面積は，上に定めた断面積を M_α がとりうる $(2J_\alpha+1)$ 個の値について平均し，さらに M_β がとりうる $(2J_\beta+1)$ 個の値について加えたものである．クレプシュ＝ゴーダン係数の直交関係を考えに入れると，これは

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\alpha\to\beta}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{a^2}{4(2J_\alpha+1)(2l_0+1)} |\langle \beta \| \boldsymbol{Q}^{(l_0)} \| \alpha \rangle|^2 \left[\sin^{-4}\frac{1}{2}\theta \sum_m |S_{l_0}^m|^2 \right]$$

になる．この断面積の角に対する関係は括弧のなかの式によって与えられ，これは数値的に計算される．注目すべきことは，核の初めの状態と終りの状態がそれらのスピン，偶奇性および遷移の電気 2^{l_0} 重極モーメントの大きさ $\langle \beta \| \boldsymbol{Q}^{(l_0)} \| \alpha \rangle$ の二乗を通してしかこの式のなかに入ってこないこと，またこの最後の量は単なる比例定数としてこの式に現われることである．それゆえ，この式を実験結果と対照することは，核の構造を特徴づけるこれらの量をごく直接的に決定する手段を与える．

§4. V が時間を含まない場合．摂動のないエネルギーの保存

V が直接に時間を含まないとき，(24) に現われる時間についての積分は容易に計算され，いくつかの簡単な性質が得られる．ここでは第1次遷移を調べるだけにしよう．

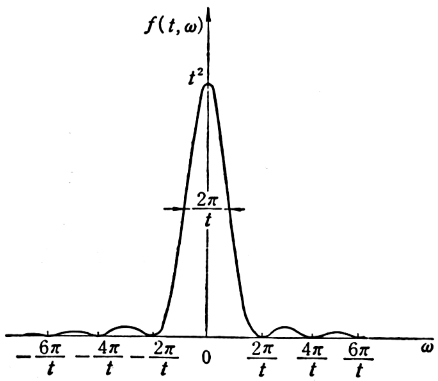
便宜上 $t_0=0$ にとる．(25) により

$$W_{a\to b}\simeq|V_{ba}|^2 f(t,\omega_{ba})/\hbar^2 \tag{40}$$

が得られ，

$$f(t,\omega)\equiv\left|\int_0^t e^{i\omega\tau}d\tau\right|^2=2(1-\cos\omega t)/\omega^2 \tag{41}$$

である．17·2 図に ω の関数としての $f(t,\omega)$ のグラフが与えられている．$\omega=0$ の値



17·2図　関数 $f(t,\omega)=2(1-\cos\omega t)/\omega^2$

の近くにおいていちじるしいピークが注目される．ピーク幅は $2\pi/t$ に等しい．ついでながら，留数の方法を使えば容易に示されるように，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t,\omega)d\omega=2\pi t \tag{42}$$

であること，また付録 A の (15 b) により，

$$f(t,\omega)\underset{t\to\infty}{\sim}2\pi t\,\delta(\omega) \tag{43}$$

が成り立つことに注意しておく．

t の値を指定するとき，$W_{a\to b}$ が終りの状態 b に依存する仕方は簡単である．定数を除くと，それは摂動の行列要素 $\langle b|V|a\rangle$ の絶対値の二乗に対して，因数 $f(t,\omega_{ba})$ による重みをつけたものであり，この因数は遷移 $a\to b$ のボーア振動数によって決まる．この重み因数は点 $\omega_{ba}=0$ において幅 $2\pi/t$ のいちじるしいピークを示すから，初期状態のエネルギーをはさんで幅

$$\delta E_0\simeq 2\pi\hbar/t$$

の帯のなかにあるエネルギーの状態に向かって，遷移は優先的に行なわれる．言いかえると〔遷移の前後で〕摂動がないとして求めたエネルギーは $2\pi\hbar/t$ の幅をもつ範囲で保存される．

この結果は時間-エネルギー不確定性関係（第4章§10および第8章§13）とある種の類似を示している．しかしながら，ここで取り扱っているエネルギーは $H^{(0)}$ であって，摂動をも含めた系の全エネルギーではなく，時間 t も $H^{(0)}$ の測定が行なわれるまでの時間であって，系の変化のリズムを特徴づける時間ではないことに十分注意しなければならない．

状態 b を指定するとき，t の関数として $W_{a\to b}$ が変わるようすも因数 $f(t,\omega_{ba})$ によって与えられる．遷移が無摂動エネルギーを厳密に保つ（$\omega_{ba}=0$）とき，それは単に t^2 のように増加する．そうでないときには周期 $2\pi/\omega_{ba}$ をもって0と $4/\omega_{ba}^2$ のあいだを振動する関数である．$W_{a\to b}$ も平均値 $2|V_{ba}|^2/(E_b-E_a)^2$ のまわりを同じ周期で振動し，t^2 の挙動を示すのは t の値がこの周期にくらべて小さいあいだに限る．

一つの特殊な状態への遷移の代りに，近いエネルギーをもつ一群の状態への遷移を取り扱うこともできる．連続スペクトルをもつ状態への遷移を考える場合には，この方法によるのが普通である．このときには，のちに詳しく述べるようないくつかの制限条件の下において，単位時間に対する遷移確率を定めることができる．

いま，連続スペクトルに属する $H^{(0)}$ の固有ベクトルから成る一つの列を考える．今後はこの列に属する個々のベクトルを $|b\rangle$ で表わし，対応する $H^{(0)}$ の固有値を $E(b)$ とする．

遷移確率を定めるに当たっては，ベクトル $|b\rangle$ の規格化に対して十分注意を払うことが望ましい．$n(b)$ は適当に定められた正の実関数であるとし，

$$\langle b|b'\rangle=\delta(b-b')/n(b)$$

となるように $|b\rangle$ が規格化されているとする．変数 b のある領域を B とするとき，B に属する状態〔から成る部分空間〕への射影子は

$$P_B=\int_B|b\rangle n(b)\mathrm{d}b\langle b|$$

である（第7章，§13を参照）．新しい変数として $E(b)$ をとり，対応する積分領域を $B(E)$ で表わせば，

$$P_B=\int_{B(E)}|b\rangle\rho_b(E)\mathrm{d}E\langle b| \tag{44}$$

ただし

$$\rho_b(E)=n(b)\mathrm{d}b/\mathrm{d}E \tag{45}$$

となる．$\rho_b(E)$ はふつうエネルギー E に対する準位 b の密度と呼ばれるものである．事実（44）によれば，これは単位エネルギー区間に対するベクトル $|b\rangle$ の個数である．ベクトル $|b\rangle$ に対して採用した規格化の仕方によって $\rho_b(E)$ は違ってくることに注意し

よう．

さて，領域 B に属する一つの状態への遷移確率 $W_{a\to B}$ は，

$$W_{a\to B} \equiv \langle a|U^{\dagger}(t,0)P_B U(t,0)|a\rangle = \int_{B(E)} W_{a\to b}\rho_b(E)\mathrm{d}E \tag{46}$$

である．(46) を得るには，〔定義式の〕P_B を (44) に置き換え，

$$W_{a\to b} = |\langle b|U(t,0)|a\rangle|^2 \tag{47}$$

と置けばよい．

形式的に見れば，〔ここで用いた〕$W_{a\to b}$ は (22) によって定義されたような遷移 $a\to b$ の確率を表わす．この量の計算に関する処理は，〔今の場合にも〕すべてそのままに成り立つ．特に，(46) の右辺に (40) を代入すれば，遷移確率 $W_{a\to B}$ が摂動の第1次まで得られる．すなわち

$$W_{a\to B} \simeq \int |V_{ba}|^2 \rho_b f(t,\omega_{ba})\mathrm{d}E/\hbar^2. \tag{48}$$

この式のなかで，$V_{ba}\equiv\langle b|V|a\rangle$ はパラメータ b を媒介とする E の関数である．

具体的に述べるために，区間 $(E_1-\varepsilon/2,\ E_1+\varepsilon/2)$ のなかにある準位 b への遷移を考え，幅 ε は十分小さく，その結果 V_{ba} と ρ_b はこの区間で事実上定数となり，積分の外へ出されると仮定しよう．また，t は十分に大きく，そのため ε は関数 f の振動の周期よりはるかに大きいとする．すなわち

$$\varepsilon \gg 2\pi\hbar/t. \tag{49}$$

このとき (48) の右辺の積分は容易に計算される．ここでつぎの二つの場合に分ける必要がある．

i) f の中央のピークが積分区間の外にある場合（エネルギーを保存しない遷移）．このとき f は多くの振動に関する平均値に置き換えられ，その結果時間を含まない式

$$W_{a\to B} \simeq 2\varepsilon\rho_b(E_1)|V_{ba}|^2/(E_1-E_a)^2$$

が得られる．

ii) f の中央のピークが積分区間のなかにある場合（エネルギーを保存する遷移）．主な寄与はこのピークから得られるから，積分の両端を無限遠までひろげても大きな誤りを犯さない．その結果（式 (42)），

$$W_{a\to B} \simeq 2\pi\hbar^{-1}|V_{ba}(E_a)|^2\rho_b(E_a)t.$$

不等式 (49) によって，この確率は他のすべての確率の和より大きい．

単位時間に対する遷移確率

$$w_{a\to B} \equiv \mathrm{d}W_{a\to B}/\mathrm{d}t$$

を導入する．上記の結果から，この量はエネルギーを保存しない遷移に対して0になり，エネルギーを保存する遷移に対しては，重要な公式

$$\boxed{w_{a\to B} \simeq \frac{2\pi}{\hbar}|V_{ba}|^2 \rho_b} \tag{50}$$

によって与えられることがわかる．この公式のなかで，行列要素 $V_{ba} \equiv \langle b|V|a\rangle$ と準位の密度 ρ_b とは，初めの状態と同じエネルギーをもつ状態 b に関係する．

公式 (50) が成り立つためには，条件 (49) が満たされる程度に t が大きくなければならない．しかし一方では，第1近似が正しい ($w_{a\to B}t \ll 1$) 程度に t は小さくなければならない．

ここに述べた証明は，公式 (50) の意味と成立条件とを明らかにする点ですぐれているが，公式だけならばもっと簡単に得られる．(40) の右辺にある f をその漸近式 (43) に置き換えれば，

$$W_{a\to b} \underset{t\to\infty}{\sim} 2\pi\hbar^{-1}|V_{ba}|^2\delta(E_b - E_a)t \tag{51}$$

となるから，この式を $W_{a\to B}$ の定義式（式 (46)）に代入すればよい．

§5. ボルン近似による断面積の計算への応用

公式 (50) から，いわゆるボルン近似，すなわち入射粒子と標的との相互作用ポテンシャルの第1近似によって衝突断面積を表わす式が導き出される．この式を得るまでの理由づけは厳密と言えないけれども，特に簡明であるという長所をもっている．同じ式の厳密な証明は第19章で与えられよう．

最も簡単な場合，すなわちポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ による1粒子の散乱という場合を考える．$V(\boldsymbol{r})$ は一つの摂動として取り扱われる．摂動のないハミルトニアンは自由粒子のそれである．すなわち

$$H = H^{(0)} + V(\boldsymbol{r}), \qquad H^{(0)} = \boldsymbol{p}^2/2m.$$

$H^{(0)}$ の固有状態は平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ である．このような波は密度1に規格化され，運動量 $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ をもつ状態を表わす．われわれは対応するケットベクトルを $|\boldsymbol{k}\rangle$ で表わす．これは直交規格化関係と完全性関係

$$\langle \boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}'\rangle = (2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'), \qquad \int|\boldsymbol{k}\rangle\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\langle\boldsymbol{k}| = 1$$

にしたがう．それゆえ，ベクトル $\boldsymbol{k}$ の空間において，このように規格化された状態の密度は定数で，$(2\pi)^{-3}$ に等しい．つまり区間 $(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}+\mathrm{d}\boldsymbol{k})$ にある状態の個数は $\mathrm{d}\boldsymbol{k}/(2\pi)^3$ である．われわれは，運動量がはっきり決まった方向 Ω をもっている状態に注目し，それらの密度すなわち前の §4（式 (45)）で定義したような量を $\rho(E)$ で表わす（定義だけから見れば，この関数は Ω によって変わりうる．実際にはこれが Ω に無関係であること

がのちにわかる）．すなわち $\rho(E)\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E$ は，運動量が立体角 $(\Omega, \Omega+\mathrm{d}\Omega)$ の方向を向き，エネルギー $E=p^2/2m$ が幅 $(E, E+\mathrm{d}E)$ のなかにある状態の個数である．したがって

$$\rho(E)\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E=\mathrm{d}\boldsymbol{k}/(2\pi)^3=\mathrm{d}\boldsymbol{p}/(2\pi\hbar)^3$$

が成り立ち，$\mathrm{d}\boldsymbol{p}=p^2\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}p$ であるから，

$$\rho(E)\mathrm{d}E=p^2\mathrm{d}p/(2\pi\hbar)^3,$$

したがって

$$\rho(E)=\frac{p^2}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}E}=\frac{mp}{(2\pi\hbar)^3} \tag{52}$$

が得られる．

ここで，エネルギー $E=mv_a^2/2$ をもつ等速の入射ビームを考え，与えられた方向 Ω_b への散乱断面積を計算してみよう．入射粒子の運動量を $\hbar\boldsymbol{k}_a$ とし，同じエネルギー E に対応するが Ω_b 方向を向いた運動量を $\hbar\boldsymbol{k}_b$ とする．初期状態 $|\boldsymbol{k}_a\rangle$ から出発すれば，すでに学んだように，立体角 $(\Omega_b, \Omega_b+\mathrm{d}\Omega)$ 方向の運動量と E に近いエネルギーをもつ状態 b の一つにこの系が遷移を行なう単位時間あたりの確率 $w_{a\to B}\mathrm{d}\Omega$ は，公式 (50) によって第1近似まで与えられる．すなわち

$$w_{a\to B}\mathrm{d}\Omega\simeq 2\pi\hbar^{-1}|\langle\boldsymbol{k}_b|V|\boldsymbol{k}_a\rangle|^2\rho(E)\mathrm{d}\Omega. \tag{53}$$

散乱の微分断面積を $\mathrm{d}\sigma_{a\to b}/\mathrm{d}\Omega$ とする．$\mathrm{d}\sigma_{a\to b}$ は単位時間と単位入射流束について，立体角 $(\Omega_b, \Omega_b+\mathrm{d}\Omega)$ 内に散乱される粒子の個数である．$|\boldsymbol{k}_a\rangle$ は流束 v_a の波であるから，

$$\mathrm{d}\sigma_{a\to b}=(w_{a\to B}/v_a)\mathrm{d}\Omega$$

が成り立つ．$w_{a\to B}$ を (53) によって与えられた近似式に置き換えると，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega}\simeq\frac{2\pi}{\hbar v_a}|\langle\boldsymbol{k}_b|V|\boldsymbol{k}_a\rangle|^2\rho_b(E) \tag{54}$$

が得られる．この式のなかで，$\rho_b(E)$ は終りの状態の密度（式 (52)）であり，

$$\langle\boldsymbol{k}_b|V|\boldsymbol{k}_a\rangle=\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_a-\boldsymbol{k}_b)\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

は遷移をひき起こしたポテンシャルの行列要素である．

§6.　周期摂動．共鳴

1次までとるとき（式 (25)），遷移確率 $W_{a\to b}$ は，関数 $V_{ba}(t)$ の調和解析における振動数 ω_{ba} の振幅の絶対値を二乗したものに比例する．ただし，区間 (t_0, t) の外部では $V_{ba}=0$ と置くと規約する．摂動 V が時間を含まないとき，この調和解析はとりわけ簡単になり，すでに確かめられたように，《無摂動エネルギーの保存》によって表わされる．もっと一般に，V が時刻の周期関数となる場合にも，調和解析はごく簡単である．このときには実際上きわめて重要な現象，すなわち共鳴の現象が生じる．

いま，V は時刻の正弦的関数で，周期 ω をもつとする．これはエルミート演算子であるから，

$$V = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + A^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

の形に書き表わされ，A は時間を含まない一つの演算子である．遷移確率 $W_{a\to b}$ の第1近似式は（$t_0 = 0$ とするとき），

$$W_{a\to b} \simeq \hbar^{-2}\left|\langle b|A|a\rangle\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{ba}+\omega)\tau}\,\mathrm{d}\tau + \langle b|A^\dagger|a\rangle\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{ba}-\omega)\tau}\,\mathrm{d}\tau\right|^2$$

となる．この式は (40) と比較されるべきものである．

ここで遷移の振幅は二つの項から成る．t を十分大きくすれば，第1項が顕著な値をとるのは，$\omega_{ba} + \omega$ が0に近いとき，すなわちエネルギー E_b が点

$$E_b = E_a - \hbar\omega \tag{55}$$

のまわりの（幅 $2\pi\hbar/t$ の）せまい帯のなかにあるときだけであり，また第2項が問題になるのは，点

$$E_b = E_a + \hbar\omega \tag{55'}$$

のまわりの（同じ幅の）帯のなかだけである．

実際には，t は十分に大きく（$t \gg 2\pi/\omega$），これらの領域は重ならない．このとき $W_{a\to b}$ が問題になるのは，(55) と (55′) がそれぞれ示すように，摂動のない系が大きさ $\hbar\omega$ のエネルギーを放出または吸収するような遷移に対してだけである．

初めの場合，遷移の振幅には第1項だけが現われ，遷移確率は式

$$W_{a\to b} \simeq |A_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)/\hbar^2$$

にまとめられる．(40) との本質的な違いは，ω_{ba} が $\omega_{ba} + \omega$ に変わっていることからくる．§4 で行なったのとまったく同様な方法で，点 $E_a - \hbar\omega$ のまわりに幅 $\Delta E(\gg 2\pi\hbar/t)$ の帯をとり，このなかにある一群の準位への遷移を考察することもできるし，いくつかの条件の下に，単位時間についての遷移確率を定めることもできる．この確率はやはり公式 (50) で与えられ，ただ一つの相違は V_{ba} と ρ_b が初めの状態より $\hbar\omega$ だけ低いエネルギーをもつ状態 b に関係することである．系が大きさ $\hbar\omega$ のエネルギーを吸収するような遷移にも同じ考察が適用される（問題2を参照）．

証明は読者に委ねることにして，V が時刻の任意の周期関数であって振動数 ω をもつという一般の場合に，どんな結果が得られるかを簡単に述べておく．このときにはフーリエ展開

$$V = \sum_{s=1}^{\infty}(A_s \mathrm{e}^{\mathrm{i}s\omega t} + A_s^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}s\omega t})$$

が成り立つ．$t \gg 2\pi/\omega$ ならば，この展開のなかの異なる項が1次の遷移確率にもたらす寄与は互いに干渉せず，各項がひき起こす遷移はそれぞれ別のエネルギー移行に対応す

る．エネルギーの幅 $2\pi\hbar/t$ を無視すれば，《A_s 遷移》において系は大きさ $s\hbar\omega$ のエネルギーを失い，《$A_s^\dagger$ 遷移》においてエネルギー $s\hbar\omega$ を受け取る．

II．ハミルトニアンの瞬間的変化または断熱変化

§7.　問題の説明と結果

しばしば起こる問題として，系が外部の場にしたがっているとき，場の変化の結果として系の力学的状態にどのような変化が生じるかを知りたいことがある．典型的な例は磁場のなかに置かれた原子系の問題である．一般的な規則として，ハミルトニアンの変化が行なわれるために必要な時間 T によって，得られる結果は決定的に左右される．本節では二つの極端な場合，すなわち T がきわめて小さい場合（瞬間的変化）と T がきわめて大きい場合（断熱変化）を調べよう．

ハミルトニアンは時刻 t_0 における初めの値 H_0 から時刻 t_1 における終りの値 H_1 まで連続的に移るものとする．

$$T = t_1 - t_0, \qquad s = (t - t_0)/T$$

と置き，時刻 $t = t_0 + sT$ においてハミルトニアンがとる値を $H(s)$ で表わす．$H(s)$ は s の連続関数であるが，これを一つ決めて今後は変えない．特に

$$H(0) = H_0, \qquad H(1) = H_1.$$

このとき，H_0 から H_1 への移行が行なわれる速さはパラメータ T によって測られるが，時刻 t_0 から時刻 t_1 までの系の変化は T だけに依存する．そこで便宜上

$$U(t, t_0) = U_T(s)$$

と置く．われわれが関心をもつ問題は本質的に $U(t_1, t_0)$ すなわち $U_T(1)$ を決定し，これがどのような形で T に依存するかを調べることである．

さきに指摘した二つの極端な場合には，結果がいちじるしく簡単であることがわかる．$T \to 0$ となる極限，すなわち無限に速い移行の場合，系の力学的状態はそのまま変わらない．すなわち

$$\lim_{T\to 0} U_T(1) = 1. \tag{56}$$

$T \to \infty$ となる極限，言いかえれば無限に緩やかな移行すなわち断熱移行の場合，初期時刻に系が H_0 の一つの固有状態にあるとすれば，時刻 t_1 には，あとで精しく述べるいくつかの条件の下に，もとの状態から連続的に導き出される H_1 の固有状態に移る．この

重要な結果は断熱定理 (4) という名で知られている.

§8. 速い移行と瞬間近似

これら二つの結果のうち，初めの方を証明するには積分方程式 (1) を思い出せばよい．系の時間的変化の演算子はこの方程式にしたがう．§7 で定めた記号によってこの方程式は

$$U_T(s) = 1 - \mathrm{i}\hbar^{-1} T \int_0^s H(s)\, U_T(s) \mathrm{d}s$$

と書かれる．$T \to 0$ となる極限において，この式の右辺は 0 に近づき，上に述べた結果 (56) が得られる．

T が十分小さいときは，第 1 近似として $U_T(1) \simeq 1$ とすることができる．これが瞬間近似あるいは速い移行による近似である．

時刻 t_0 における系の状態ベクトルを $|0\rangle$ で表わし，$|0\rangle$ に直交するベクトル全体の空間への射影子を Q_0 とする．$|0\rangle$ のノルムは 1 であるとすれば，

$$Q_0 = 1 - |0\rangle\langle 0|$$

が成り立つ．瞬間近似は

$$U(t_1, t_0)|0\rangle \simeq |0\rangle$$

と書き表わされる．この近似に伴う誤差の大きさは，初期状態と異なる状態にこの系を見いだす確率 ϖ，すなわち

$$\varpi = \langle 0|U^\dagger(t_1, t_0) Q_0 U(t_1, t_0)|0\rangle = \langle 0|U_T^\dagger(1) Q_0 U_T(1)|0\rangle \tag{57}$$

によって与えられる．

この近似に対する補正は，§1 で説明した摂動法によって計算することができる．この場合 ($H^{(0)} = 0$, $V = H$)，第 0 近似は単に演算子 1 であり，展開 (17) によって

$$U_T(1) = 1 - \mathrm{i}\hbar^{-1} T \int_0^1 H(s) \mathrm{d}s + (\mathrm{i}\hbar)^{-2} T^2 \int_0^1 \mathrm{d}s_1 \int_0^{s_1} \mathrm{d}s_2 H(s_1) H(s_2) + \cdots \tag{58}$$

が得られる．

特に，この展開を (57) の右辺に代入すれば，T のべきによる ϖ の展開が得られる．$Q_0|0\rangle = 0$ であるから，最低次の項は T^2 の項であり，それは展開 (58) の最初の 2 項を代入することで得られる．

---

(4) これはまたエーレンフェストの定理とも呼ばれる．このテーマについてのエーレンフェストの仕事は，古典力学と前期量子論に関係している．量子力学にまでこの定理を拡張したのは本質的に M. Born と V. Fok, *Zeit. f. Phys.*, **51** (1928), 165 である．また，T. Kato, *Journ. Phys. Soc. Jap.*, **5** (1950), 435; K. O. Friedrichs, *On the Adiabatic Theorem in Quantum Theory*, Report IMM. NYU-218, New York, 1955 を見よ．

$$\bar{H} = \int_0^1 H(s)\mathrm{d}s = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_1} H\mathrm{d}t \tag{59}$$

と置けば，

$$\varpi = \frac{T^2}{\hbar^2}\langle 0|\bar{H}Q_0\bar{H}|0\rangle + O(T^3)$$

となる．また

$$\langle 0|\bar{H}Q_0\bar{H}|0\rangle = \langle 0|\bar{H}^2|0\rangle - \langle 0|\bar{H}|0\rangle^2 = (\Delta\bar{H})^2$$

であり，$\Delta\bar{H}$ は状態 $|0\rangle$ におけるオブザーバブル $\bar{H}$ の標準偏差であるから，

$$\varpi = \frac{T^2(\Delta\bar{H})^2}{\hbar^2} + O(T^3) \tag{60}$$

となる．それゆえ条件 $\varpi \ll 1$，すなわち瞬間近似が正当であるための判定条件により

$$\boxed{T \ll \hbar/\Delta\bar{H}} \tag{61}$$

が得られる (5)．

条件 (61) は時間-エネルギー不確定性関係の特殊な形式にほかならない．事実 (59) によれば，$\bar{H}$ は系のハミルトニアンの時間 (t_0, t_1) における平均である．それゆえこの期間を通じて系の変化はおおよそハミルトニアン $\bar{H}$ によって支配される．時間-エネルギー不確定性関係により，このような運動方程式にしたがう系の状態は，時間 $\hbar/\Delta\bar{H}$ の終りまでいちじるしい変形を受けない．それゆえ時間 T の終りにおいてこの状態の変化が無視できるための条件はちょうど条件 (61) になる．

§9.　磁場の急激な反転

一例として，一様な磁場のなかにある原子を考え，場の向きを急に反転するとき何が起こるかを調べる．LS 結合が成り立つための条件は満たされており，初期時刻において場は十分に強く，全スピン $\boldsymbol{S}$ と軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ とは完全に分離されていると仮定する（パッシェン=バック効果）．また，議論を簡単にするため，磁場はつねに z 軸に平行であって，線形な法則

$$\mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0[2s-1] = \mathscr{H}_0[2(t-t_0)/T-1] \tag{62}$$

にしたがって $-\mathscr{H}_0$ から $\mathscr{H}_0$ まで値を変えると考える．

第16章の研究（§9－12）によれば，系のハミルトニアンは

(5)　条件 $\varpi \ll 1$ から必ずしも $U_1(t_1, t_0)|0\rangle \simeq |0\rangle$ は出てこない．ただ，これら二つのベクトルは本質的に位相因数しか違わないと言えるだけである．しかしながら公式 (60) は展開 (58) が速く収束することを前提としており，偶発的なことがなければ，条件 (61) はこの収束が確かに速いための十分条件である．

$$H = H^{(0)} + A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}) - \frac{e}{2mc}(L_z + 2S_z)\mathscr{H}(t) \tag{63}$$

という形であり，$H^{(0)}$ は LS 結合における摂動のないハミルトニアンである．法則(62)により，磁場の時間による平均は0であるから，H の平均は場のないときのハミルトニアンに等しい．すなわち

$$\bar{H} = H^{(0)} + A(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}).$$

いま，初期時刻において系が H の固有状態の一つにあるとしよう．この時刻にパッシェン＝バック効果の条件は満たされているから，その状態ベクトルは第16章 §11 で定義したベクトル $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ の一つとほとんど同じものである．そこで $|0\rangle = |\alpha LSM_L M_S\rangle$ と置く．偏差 $\Delta\bar{H}$ の計算に重大な困難はない．$|\alpha LSM_LM_S\rangle$ は $H^{(0)} + AL_zS_z$ の固有ベクトルであるから，偏差に対する寄与は差 $A(L_+S_- + L_-S_+)/2$ だけから出てくる．計算の結果は

$$\Delta\bar{H} = \frac{1}{2}A\hbar^2[2(L(L+1) - M_L^2)(S(S+1) - M_S^2) - 2M_LM_S]^{1/2}$$

となる．括弧のなかは1程度の数値因数である（$M_L = \pm L$, $M_S = \pm S$ という二つの極端な場合には0となる）．それゆえ偏差 $\Delta\bar{H}$ は $A\hbar^2$ 程度の大きさ，すなわちスピン－軌道相互作用による LS 準位の分離と同じ程度の大きさである．

したがって，

$$T \ll 1/A\hbar \tag{64}$$

のとき，瞬間的移行の条件 (61) が満たされる．すなわち場を反転するとき，状態ベクトルは事実上一定のまま保たれる．しかし原子の力学的状態が一定であるためには，状態ベクトルが位相因数だけ変わってもよい．それゆえ不等式 (64) は，場を反転するとき原子が同じ状態にとどまるための十分条件ではあるが，必要条件ではない．§14 の終りでわれわれはもう一度この点にもどるであろう．

§10. 断熱移行．一般論．自明の場合

この節の残りでは，もう一つの極端な場合として，ハミルトニアンがきわめて緩やかに変化する場合を調べる．われわれは §7 の記号をそのまま使う．

最初にしなければならないのは，断熱定理を明らかにすることである．この定理は $H(s)$ のとびとびのスペクトル状態の性質に関係する．議論を簡単にするために，H のスペクトルは完全にとびとびであると仮定するが，この制限は本質的なものではない (6)．

(6) とびとびの固有値とそれらの部分空間が，のちに述べる連続性，《非交さ性》，微分可能性の条件を満たしさえすればよい．T. Kato, 前掲論文，脚注 (4) を参照．

H の固有値列を $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_j, \cdots$ で表わし，これらの部分空間への射影子をそれぞれ $P_1, P_2, \cdots, P_j, \cdots$ とする．これらは s の連続関数であると仮定する．またそのほかにつぎの仮定を設ける．

i) 遷移の期間 $0 \leqslant s \leqslant 1$ を通じて，各固有値は互いに異なる値をとりつづける．すなわち

$$\text{任意の } j \neq k \text{ に対して} \qquad \varepsilon_j(s) \neq \varepsilon_k(s). \tag{65}$$

ii) 導関数 $\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s$, $\mathrm{d}^2P_j/\mathrm{d}s^2$ が確かに存在し，この区間全体で連続である．ただし場合によっては第1種不連続点があってもよい．

時間的変化の演算子 $U_T(s)$ はシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} U_T(s) = TH(s)U_T(s) \tag{66}$$

の解であり，ハミルトニアン $H(s)$ は式

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s) P_j(s) \tag{67}$$

によって与えられる．断熱定理によって，$U_T(s)$ は漸近的性質

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)P_j(0) = P_j(s) \lim_{T\to\infty} U_T(s) \qquad (j = 1, 2, \cdots) \tag{68}$$

をもつことが保証される[7]．

まず初めに，$H(s)$ の各固有値の部分空間が動かないと仮定する．すなわち

$$P_j(s) = P_j(0) \equiv P_j \qquad (j = 1, 2, \cdots).$$

この場合 $H(s)$ は

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s) P_j$$

という形に書き表わされ，どの s についても各射影子 P_j と交換する．それゆえ各 P_j は運動の定数である．すなわち

$$U_T(s)P_jU_T^\dagger(s) = P_j. \tag{69}$$

関係 (69) はどのような T についても成り立つから，$T\to\infty$ のときも当然成り立つ．

また，この特別な場合には方程式 (66) が厳密に積分され，

$$U_T(s) = \exp\left(-\mathrm{i}T\int_0^s H(\sigma)\mathrm{d}\sigma/\hbar\right) = \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\varphi_j(s)/\hbar} P_j. \tag{70}$$

---

(7) この性質は前に §7 で述べた性質と同値である．実際，固有値 $\varepsilon_j(0)$ に対応する $H(0)$ の固有ベクトルの一つを $|j\rangle$ とすれば，$P_j(0)|j\rangle = |j\rangle$ であり，性質 (68) によって，

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle = P_j(s) \lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle$$

が得られる．それゆえベクトル $U_T(s)|j\rangle$ は $T\to\infty$ のとき確かに $\varepsilon_j(s)$ の部分空間のベクトルの一つに近づく．

ここで記号

$$\varphi_j(s)=\int_0^s \varepsilon_j(\sigma)\mathrm{d}\sigma \tag{71}$$

を用いている．その結果，時刻 t_0 における系の状態ベクトルが固有値 $\varepsilon_j(0)$ に対応する $H(0)$ の固有ベクトルの一つであるとき，時刻 t_1 における状態ベクトルはそれと位相因数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\varphi_j(1)/\hbar}$ しか違わない．

§11.　回転軸表示

一般の場合には，ハミルトニアン $H(s)$ の固有軸がヒルベルト空間のなかである回転運動を行なうから，シュレーディンガー方程式を厳密に積分することができなくなる．それゆえ，一般の場合を取り扱うための第一歩は，表示を適当に変更することによって，この軸の回転運動をできるだけ完全に消してしまうということになる．

そこで一つのユニタリ演算子 $A(s)$ を考え，これが

$$P_j(s)=A(s)P_j(0)A^{\dagger}(s) \qquad (j=1,2,\cdots) \tag{72}$$

という性質をもつとする．ユニタリ変換 $A(s)$ によって，$H(0)$ の基底系はすべて $H(s)$ の基底系に変換され，$H(0)$ の各固有ベクトルは，それから連続的に導かれた $H(s)$ の固有ベクトルの一つに変換される．

$A(s)$ は初期条件

$$A(0)=1 \tag{73}$$

と微分方程式

$$\mathrm{i}\hbar\,\mathrm{d}A/\mathrm{d}s=K(s)A(s) \tag{74}$$

によって曖昧さを残さずに定められる．ただし $K(s)$ は適当なエルミート演算子である．条件 (72) が満たされるためには，$K(s)$ が交換関係

$$[K(s),P_j(s)]=\mathrm{i}\hbar\,\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s \qquad (j=1,2,\cdots) \tag{75}$$

にしたがうことが必要十分である．

実際 (72) の両辺を s に関して微分すれば (75) が得られるから，これは必要である．また $A(s)$ と $P_j(s)$ が (74) と (75) をそれぞれ満たすならば，式

$$A^{\dagger}(s)P_j(s)A(s)$$

の s に関する導関数は 0 になるから，この式はつねに初期値 $P_j(0)$ に等しい．したがって (75) は十分条件である．

関係 (75) によって $K(s)$ がただ一とおりに定められるのではない．実際，s に依存する任意の演算子を $f_k(s)$ とするとき，演算子 $\sum_k P_k(s)f_k(s)P_k(s)$ を $K(s)$ に付け加えてもこの関係はやはり満たされる．言いかえれば，射影 $P_j(s)K(s)P_j(s)$ $(j=1,2,\cdots)$ は

任意に決めてよい．あとで明らかになる理由によって，われわれは補充条件

$$P_j(s)K(s)P_j(s) = 0 \qquad (j = 1, 2, \cdots) \tag{76}$$

を課してこの任意さを取り除く．こうすれば

$$K(s) = \mathrm{i}\hbar \sum_j \frac{\mathrm{d}P_j(s)}{\mathrm{d}s} P_j(s)$$

が得られる（問題5）．

シュレーディンガー表示のベクトルと演算子にユニタリ変換 $A^\dagger(s)$ を施せば，一つの新しい表示において対応するベクトルと演算子とが得られる．これが《回転軸表示》である．特にオブザーバブル $H(s)$ は

$$H^{(A)}(s) = A^\dagger(s)H(s)A(s)$$

に変換されるが，(67) と (72) を考えに入れると，

$$H^{(A)}(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)P_j(0) \tag{77}$$

が得られる．また $K(s)$ は

$$K^{(A)}(s) = A^\dagger(s)K(s)A(s) \tag{78}$$

に変換される．

この新しい表示における時間的変化の演算子は

$$U^{(A)}(s) \equiv A^\dagger(s)U_T(s) \tag{79}$$

である．これは

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} U^{(A)}(s) = [TH^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)]U^{(A)}(s) \tag{80}$$

$$U^{(A)}(0) = 1 \tag{81}$$

によって定められる（式 (12) を参照；ここでは $V = TH - K$ にとる必要がある）．

§12.　断熱定理の証明

方程式 (80) の積分は，$TH^{(A)}$ に対して $K^{(A)}$ を無視することができるならば容易である．実際このときは，§10 で学んだ自明の場合に帰着する．こうしてつくられたシュレーディンガー方程式の解を $\Phi_T(s)$ で表わす．すなわち

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s} \Phi_T(s) = TH^{(A)}(s)\Phi_T(s) \tag{82}$$

$$\Phi_T(0) = 1. \tag{83}$$

これから

$$\Phi_T(s) = \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\varphi_j(s)/\hbar} P_j(0) \tag{84}$$

が得られる（式 (70)）．φ_j はここでも (71) によって定めたものである．

さて，定義 (77) と (78) を思い出せば，$H^{(A)}(s)$ と $K^{(A)}(s)$ は T に無関係であることが確かめられる．それゆえ，$T\to\infty$ となる極限において，方程式 (80) の右辺にある $K^{(A)}(s)$ の効果は $TH^{(A)}$ の効果によって完全に隠され，$U^{(A)}(s)$ は $\Phi_T(s)$ に近づくことが予想される．あとでわかるように，この性質はうまく確かめられ，したがって (式 (79))，

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\Phi_T(s). \tag{85}$$

これを示すためには，新しいユニタリ変換を考え，

$$W \equiv \Phi_T^\dagger U^{(A)} = \Phi_T^\dagger A^\dagger U_T \tag{86}$$

と置く．(80) と (82) から，この新しいユニタリ演算子の時間的変化の方程式を導き出すことはやさしい．積分の形で書けば，

$$W(s) = 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^s \bar{K}(\sigma)W(\sigma)\mathrm{d}\sigma \tag{87}$$

となり，$\bar{K}$ は

$$\bar{K}(s) \equiv \Phi_T^\dagger(s)K^{(A)}(s)\Phi_T(s) \tag{88}$$

$$= \Phi_T^\dagger A^\dagger K A \Phi_T. \tag{89}$$

核関数 $\bar{K}(s)$ は振動する関数の和であり，T を大きくすればその振動数は限りなく増し，その結果ボルテラ型積分方程式 (87) の右辺にある積分は $T\to\infty$ のとき 0 に近づくことを示そう．

任意の演算子 Q は

$$Q = \sum_j \sum_k P_j(0)QP_k(0)$$

と分解される [8]．今後は記号

$$Q_{jk} \equiv P_j(0)QP_k(0)$$

を使う．(72)，(84)，(89) から，特に

$$\bar{K}_{jk} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}T(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar} K_{jk}^{(A)}, \qquad K_{jk}^{(A)} = A^\dagger(s)P_j(s)K(s)P_k(s)A(s) \tag{90}$$

が導き出される．条件 (76) により $K_{jj}^{(A)}$ $(j=1,2,\cdots)$ はすべて 0 であるから，$\bar{K}$ の分解の対角部分 $\bar{K}_{jj}$ はすべて厳密に 0 になる．すなわち

$$\bar{K}_{jj} = 0 \qquad (j=1,2,\cdots). \tag{91}$$

非対角部分 $\bar{K}_{jk}(j\neq k)$ について言えば，これらは振動する因数

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}T(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar} \equiv \exp\left[\mathrm{i}\hbar^{-1}T\int_0^s(\varepsilon_j(\sigma)-\varepsilon_k(\sigma))\mathrm{d}\sigma\right]$$

---

[8] ここで用いる手順は，$H(0)$ を対角型にする表現を利用するのと実質的には同じである．ただ $H(0)$ の準位の縮退と基底ベクトルの位相の任意さの結果として生じるいろいろな紛糾を避けるだけである．

を含む．この振動の角振動数を求めるには，この指数関数の位相を s について微分すればよい．その結果は

$$T|\varepsilon_j(s)-\varepsilon_k(s)|/\hbar$$

となる．仮定 (65) により差 $\varepsilon_j-\varepsilon_k$ はけっして0にならないから，$T\to\infty$ のとき振動数は T に比例して増大する．

ここで演算子

$$F(s)\equiv\int_0^s \bar{K}(\sigma)\mathrm{d}\sigma \tag{92}$$

を考えよう．性質 (91) により，この対角要素はすべて0になる．すなわち

$$F_{jj}=0.$$

非対角要素について言えば，それらは

$$F_{jk}=\int_0^s \mathrm{e}^{\mathrm{i}T(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\,K_{jk}^{(A)}\,\mathrm{d}\sigma \qquad (j\neq k) \tag{93}$$

と書き表わされ，$K_{jk}^{(A)}$ は s の連続関数であり，T には無関係である．指数関数の部分については，その位相がけっして停留値を取らないことがわかっている．ゆえに F_{jk} は $\int_0^s \mathrm{e}^{\mathrm{i}T\alpha(\sigma)}f(\sigma)\mathrm{d}\sigma$ という形になり，$f(\sigma)$ は連続な関数，$\alpha(\sigma)$ は連続で単調な関数である．このような積分は $T\to\infty$ のとき0に近づくことが知られている．実際，部分積分法により，

$$F_{jk}(s)=\frac{\hbar}{\mathrm{i}T}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}T(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\,\frac{K_{jk}^{(A)}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\bigg|_0^s-\int_0^s \mathrm{e}^{\mathrm{i}T(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\left(\frac{K_{jk}^{(A)}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\right)\right]\mathrm{d}\sigma\right]. \tag{94}$$

$K_{jk}^{(A)}$ のほか，$K_{jk}^{(A)}$，ε_j，ε_k の s に関する導関数が有限であるならば，括弧のなかの式も有限であることは明らかである．それゆえ F_{jk} は $1/T$ のように漸近的に0に近づく．つまり，$T\to\infty$ のとき

$$F(s)=O\left(\frac{1}{T}\right)$$

が成り立つ．

ところで，方程式 (87) の右辺に部分積分法を施せば，

$$F(s)W(s)-\int_0^s F(\sigma)\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}\sigma}\mathrm{d}\sigma$$

となり，さらに微分方程式 $\mathrm{d}W/\mathrm{d}s=\mathrm{i}\bar{K}W/\hbar$ を考えに入れると，

$$F(s)W(s)-\mathrm{i}\hbar^{-1}\int_0^s F(\sigma)\bar{K}W(\sigma)\mathrm{d}\sigma \tag{95}$$

と書き直される．この式 (95) の二つの項は因数として演算子 F を含むから，$T\to\infty$ の

とき $1/T$ のように0に近づく．したがって[9]

$$W = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right). \tag{96}$$

W の定義 (86) を思い出せば，これからすでに述べた結果

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\Phi_T(s)\left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right)\right] \tag{97}$$

が導き出される．

$\Phi_T(s)$ は射影子 $P_j(0)$ と交換し（式 (84) を参照），またユニタリ演算子 $A(s)$ は性質 (72) をもつから，

$$A(s)\Phi_T(s)P_j(0) = P_j(s)A(s)\Phi_T(s)$$

が成り立つ．それゆえ上に得られた $U_T(s)$ の漸近式は確かに関係 (68) を満たす．

（証明終）

§13. 断熱近似

T が十分に大きいとき，あるいはもっと正確に言えば，<u>$H(t)$ の固有軸が十分緩やかにまわるとき</u>，時間的変化の演算子 $U_T(1)$ は第1近似として漸近式

$$U(t_1, t_0) \equiv U_T(1) \simeq A(1)\Phi_T(1) \tag{98}$$

に置き換えられる．これが**断熱近似**である．

時刻 t_0 における系の状態を表わすノルム1のベクトルを $|0\rangle$ とし，このベクトルの補空間への射影子を Q_0 とする．断熱近似とは

$$U(t_1, t_0)|0\rangle \simeq A(1)\Phi_T(1)|0\rangle$$

と書くことを意味している．この近似から生じる誤差の一つの評価は，時刻 t_1 において系が $A(1)\,\Phi_T(1)|0\rangle$ と異なる状態に見いだされる確率 η によって与えられる．このベクトルに直交する空間への射影子は

$$Q_1 \equiv A(1)\Phi_T(1)Q_0\Phi_T^\dagger(1)A^\dagger(1)$$

---

[9] 厳密に言えば，いま述べた議論が成り立つのは演算子 $K(s)$ が区間 $(0, 1)$ の全体で有界であるときに限る（第16章，脚注[11]を参照）．このときには $\|F(s)\|$ が s に関して一様に，$1/T$ のように0に近づくことが示される．$\|K(s)\|$ と $\|F(s)\|$ の上限をそれぞれ κ と η で表わそう．W, Φ, A はすべてユニタリであるから，K, $K^{(A)}$, $\bar{K}$, KW のノルムは等しく，また F と FW のノルムも等しい．したがって

$$\|FW\| \leqslant \eta, \qquad \left\|\int_0^s F\bar{K}W\,\mathrm{d}\sigma\right\| \leqslant \eta\kappa s.$$

また $W-1$ は (95) で表わされるから，

$$\|W-1\| \leqslant \eta(1+\kappa s).$$

であるから，

$$\eta \equiv \langle 0|U^{\dagger}(t_1,t_0)Q_1 U(t_1,t_0)|0\rangle = \langle 0|W^{\dagger}(1)Q_0 W(1)|0\rangle$$

となる．

断熱近似に対する補正は，§1の摂動法によって計算することができる．$U^{(0)}$ の役割をここで演じるのは $A(1)\Phi_T(1)$ であり，U_I の役割を演じるのは $W(1)$ である．この方法によれば，積分方程式 (87) から反復法によって得られる W の展開式において，初めの数項だけをとることになる．1次の項までとれば，

$$W(1) \simeq 1 + (\mathrm{i}F/\hbar) \tag{99}$$

が得られる．ただし F は (92) によって定められる演算子 $F(1)$ を表わす．

この展開は η を評価するためにも利用される．瞬間近似の場合に ϖ を計算するとき行なったのと同じような処理を済ませると，

$$\eta \simeq \hbar^{-2}\langle 0|FQ_0F|0\rangle = (\Delta F/\hbar)^2 \tag{100}$$

が得られる．ΔF は状態 $|0\rangle$ におけるオブザーバブル F の標準偏差である．それゆえ，条件 $\eta \ll 1$，すなわち断熱近似が成り立つための条件は

$$\Delta F \ll \hbar$$

と書き表わされる [10]．

きわめて一般的なこの形に表わしても，瞬間的近似の場合これに相当する結果（関係 (61)）とくらべて，この結果はずっと役に立たない．実際，ここに入ってきたオブザーバブル F をつくることは，瞬間近似のオブザーバブル $\bar{H}$ よりむずかしい．$\bar{H}$ は $H(t)$ の積分として簡単に得られるのであるが，F を計算するためには区間 (t_0, t_1) の各点に対して $H(t)$ の固有値問題を解き，さらにこのような各点に対して演算子 $A(s)$ をつくることが必要である．

初めの状態が $H(0)$ の固有状態であるという仮定の下に，断熱近似が成り立つための条件を調べよう．この場合を除けば実際的な興味はないからである．

今後は s を媒介にしないでただちに変数 t を使う．特に時刻 t におけるハミルトニアンの固有値を $\varepsilon_j(t)$ で表わし，対応する射影子を $P_j(t)$，《回転軸への移行》の演算子を $A(t)$，演算子 $\Phi_T(s)$ を $\Phi(t)$ で表わす．その結果，定義 (67) と (84) はつぎの定義に置き換えられる．

$$H(t) = \sum_j \varepsilon_j(t) P_j(t) \tag{101}$$

$$\Phi(t) = \sum_j \exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t} \varepsilon_j(\tau)\mathrm{d}\tau/\hbar\right) P_j(0). \tag{102}$$

---

(10)　このことについては，瞬間近似が成り立つための判定条件に関して述べた脚注 (5) と同じ注意を与えることができる．

A を定める方程式 (73) と (74) は

$$i\hbar\, \mathrm{d}A/\mathrm{d}t = K'(t)\,A(t), \qquad A(0) = 1 \tag{103}$$

となり，K' は

$$K'(t) \equiv K(s)/T = i\hbar \sum_j (\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}t)\,P_j(t). \tag{104}$$

定義 (92) から

$$F \equiv F(t_1) = \int_{t_0}^{t_1} \Phi^\dagger(t)\,A^\dagger(t)\,K'(t)\,A(t)\,\Phi(t)\,\mathrm{d}t \tag{105}$$

が導き出される．

また，本質的な仮定ではないが，$H(t)$ のスペクトルにはまったく縮退がないとし，ハミルトニアン $H(0)$ の固有軸 $|1\rangle_0, |2\rangle_0, \cdots, |j\rangle_0, \cdots$ から成る系を一つ選ぶ．$H(t)$ の固有軸系をつくるベクトルを $|1\rangle_t, |2\rangle_t, \cdots, |j\rangle_t, \cdots$ で表わす．これらは前のものから変換 $A(t)$ によって導き出される．すなわち任意の t に対して，

$$|j\rangle_t = A(t)\,|j\rangle_0, \qquad H(t)\,|j\rangle_t = \varepsilon_j(t)\,|j\rangle_t, \qquad P_j(t) = |j\rangle_t\,{}_t\langle j| \tag{106}$$
$$(j = 1, 2, \cdots)$$

が成り立つ．

ここで，時刻 t_0 における系の状態ベクトルを $|i\rangle_0$ とする．断熱近似によれば，時刻 t_1 における状態ベクトルは $|i\rangle_1 \equiv A(t_1)\,|i\rangle_0$ と位相因数しか違わない．すなわち

$$U(t_1, t_0)\,|i\rangle_0 \simeq \exp\left(-i\int_{t_0}^{t_1} \varepsilon_j(\tau)\,\mathrm{d}\tau/\hbar\right)|i\rangle_1. \tag{107}$$

系が $H(t_1)$ の別の固有状態 $|j\rangle_1$ に見いだされる確率 $p_{i\to j}\,(j \neq i)$ は，定義により

$$p_{i\to j} = |{}_1\langle j|\,U(t_1, t_0)\,|i\rangle_0|^2$$

である．さきに述べた摂動の計算によれば，

$$p_{i\to j} \simeq |{}_0\langle j|\,F\,|i\rangle_0|^2/\hbar^2 \tag{108}$$

が得られるから，

$$\eta_i = \sum_{j\neq i} p_{i\to j} \simeq \hbar^{-2} \sum_{j\neq i} {}_0\langle i|\,F\,|j\rangle_0\,{}_0\langle j|\,F\,|i\rangle_0$$

となり，前の結果 (100) と一致する．

(102)，(104)，(105) と，(106) で与えられた $|j\rangle_t$ の性質を使えば，

$${}_0\langle j|\,F\,|i\rangle_0 = i\hbar \int_{t_0}^{t_1} \alpha_{ji}(t) \exp\left[i\int_{t_0}^{t} \omega_{ji}(\tau)\,\mathrm{d}\tau\right]\mathrm{d}t$$

となる．ただし

$$\alpha_{ji}(t) \equiv {}_0\langle j|\,A^\dagger(t)(\mathrm{d}P_i/\mathrm{d}t)\,A(t)\,|i\rangle_0 = {}_t\langle j|\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|i\rangle_t\right) \tag{109}$$

$$\omega_{ji}(t) = [\varepsilon_j(t) - \varepsilon_i(t)]/\hbar. \tag{110}$$

それゆえ (108) により

$$p_{i\to j} \simeq \left|\int_{t_0}^{t_1} \alpha_{ji}(t) \exp\left[\mathrm{i}\int_{t_0}^{t} \omega_{ji}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\mathrm{d}t\right|^2 \tag{111}$$

が得られる．α_{ji} および ω_{ji} という量の物理的意味は定義 (109) と (110) からただちに読みとられる．$\alpha_{ji}(t)$ は $H(t)$ の固有軸の回転速度を特徴づける量である．すなわち，軸 $|i\rangle_t$ の速度の $|j\rangle_t$ 方向の成分である．$\omega_{ji}(t)$ は遷移 $i\to j$ の《ボーア振動数》である．

(111) の右辺の被積分関数は，関数 $\alpha_{ji}(t)$ に振動数 $\omega_{ji}(t)$ で振動する指数関数を掛けた積である．α_{ji} と ω_{ji} が時間を含まないとき，この積分は容易に計算され，

$$p_{i\to j} \simeq \left|\frac{\alpha_{ji}}{\omega_{ji}}\right|^2 2(1-\cos\omega_{ji}T)$$

となる．それゆえ $p_{i\to j}$ は $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$ 程度の大きさである．α_{ji} と ω_{ji} が必ずしも定数でなくても，時刻とともに十分滑らかに変わるならば，$p_{i\to j}$ は大きく見積っても，区間 (t_0, t_1) において $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$ が到達する最大値程度の大きさである．すなわち

$$p_{i\to j} \lesssim \max\left|\frac{\alpha_{ji}(t)}{\omega_{ji}(t)}\right|^2. \tag{112}$$

また η_i は大きく見積っても，状態 i と異なるすべての状態 j について不等式 (112) の右辺を加えて得られる量の程度の大きさである．普通の場合，この和は $|\alpha_i^{\mathrm{max.}}/\omega_i^{\mathrm{min.}}|^2$ という式で上から押さえられる．この式のなかで，$\omega_i^{\mathrm{min.}}$ は i から一番近くの状態へ移るときのボーア振動数の最小値，$\alpha_i^{\mathrm{max.}}$ は

$$\alpha_i^2(t) = \sum_{j\neq i} |\alpha_{ji}(t)|^2$$

によって定められる正の量 $\alpha_i(t)$ の最大値である．α_{ji} の定義式 (109) を思い出し，さらに

$${}_t\langle i|\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|i\rangle_t\right) = 0 \tag{113}$$

に注意すれば[11]，α_i はベクトル $\mathrm{d}|i\rangle_t/\mathrm{d}t$ の大きさ，すなわち固有軸 $|i\rangle_t$ の《角速度》であることがわかる．それゆえ，普通の場合は

---

[11] 事実，関係 (104) と (106) から，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|j\rangle_t = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(t)|j\rangle_0 = \frac{\mathrm{d}P_j}{\mathrm{d}t}|j\rangle_t \qquad (j=1,2,\cdots)$$

が導かれる．恒等式 $P_j(t)|j\rangle_t = |j\rangle_t$ の両辺を微分して得られる結果に上の結果を対照すれば，$P_j(\mathrm{d}|j\rangle_t/\mathrm{d}t) = 0$，したがって

$${}_t\langle j|\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|j\rangle_t\right) = 0 \qquad (j=1,2,\cdots) \tag{113'}$$

が得られる．ベクトル $|j\rangle_t$ は $H(t)$ の固有ベクトルであるという条件により，位相因数を除いて定められるが，条件 (113′) により位相因数も決められる．

$$\boxed{\left|\frac{\alpha_i^{\max.}}{\omega_i^{\min.}}\right|^2 \equiv \left|\frac{|i\rangle_t \text{ の最大角速度}}{|i\rangle_t \text{ の最小ボーア振動数}}\right|^2 \ll 1} \tag{114}$$

であるとき確かに条件 $\eta_i \ll 1$ は満たされる．

条件 (114) は断熱近似が成り立つための判定条件とみなされる．事実これは強すぎる制限条件であるが，比較的取り扱い易いという長所をもっている．$\alpha_i(t)$ を計算するためにも，不等式 (112) の右辺に現われる量 $|\alpha_{ji}(t)|$ を計算するためにも，$A(t)$ を決定する必要はないということを特に注意しなければならない．そのためには $H(t)$ の固有値問題を解き，位相因数は別にしてベクトル $|i\rangle_t$, $|j\rangle_t$ を決めさえすればよい．実際

$$\alpha_{ji}(t) = -\,{}_t\!\left\langle j\left|\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\right|i\right\rangle_t \Big/ \hbar\omega_{ji}(t)$$

であることが示される（問題6を参照）．

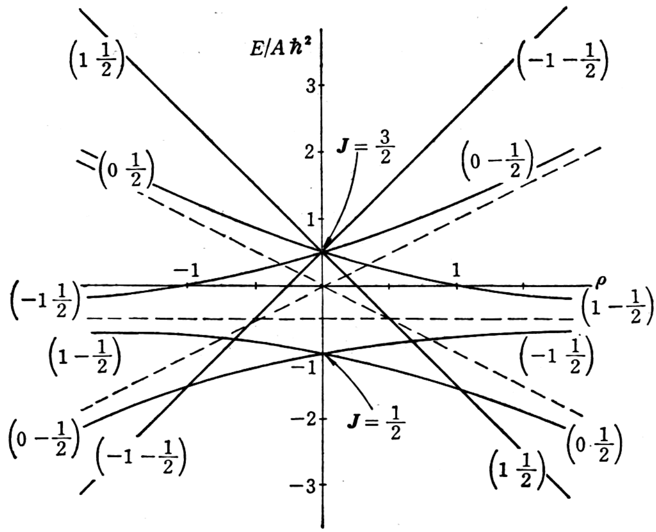
§14. 磁場の断熱的な反転

§9の問題に返り，同じ記号を使う．われわれは同じ初期条件から出発するが，今後は条件 (64) が満たされていないとする．

この系のハミルトニアンの形 (63) を調べると，α, L, S および $M_J \equiv M_L + M_S$ は良い量子数であることがわかる（$H(t)$ は実際どの t に対しても $J_z \equiv L_z + S_z$ と交換する）．それゆえ，初めの状態ベクトルが $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ であれば，時間が経過してもこのベクトルは，α, L, S および $M_L + M_S$ が同じ値をとるようなベクトルの空間のなかを動く．

初期状態が一つの ^2P 状態である場合を詳しく調べよう．全部で6個の異なる ^2P 状態があり，それらは6個の基底ベクトル $|\alpha 1 \frac{1}{2} M_L M_S\rangle (M_L = 1, 0, -1\,;\, M_S = 1/2, -1/2)$ の線形結合である．今後はこれらを記号 $|M_LM_S\rangle$ で表わす．これらはすべて $H^{(0)}$ の固有状態であるから，対応する固有値をエネルギーの零点にとることができる．こうすれば，エネルギー H の対応する準位を決めるのは容易である（第16章，問題7）．これらはパラメータ $\rho = \mu_\mathrm{B}\mathscr{H}/A\hbar^2$（$\mu_\mathrm{B} \equiv e\hbar/2mc$ = ボーア磁子）の関数であり，そのグラフは17·3図に与えられる．各準位は $M_J = M_L + M_S$ のはっきり決まった値に対応し，その値に結びついた固有ベクトルは，$\rho \to \pm\infty$ となる各極限においてベクトル $|M_LM_S\rangle$ の特殊な一つに近づく．このことは図上に示したとおりである．われわれは $M_J = 3/2$ と $M_J = 1/2$ の場合を順に調べよう．

まず $M_J = 3/2$ の場合を考える．この J_z の値に対する状態はただ一つで，対応するベクトルは $|1\,\frac{1}{2}\rangle$ である．これはどの t に対しても必ず H の固有ベクトルである．事実，簡単な計算によって，



17·3図　磁場の強さ $\mathscr{H}$ の関数とみなした ^2P 準位の位置 ($\rho=\mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2$)．各曲線の両端にある括弧内の数値は，$\rho\to\pm\infty$ の両極限における固有状態の量子数 ($M_L M_S$) である．

$$H\left|1\ \ \frac{1}{2}\right\rangle = A\hbar^2\left(\frac{1}{2}-2\rho(t)\right)\left|1\ \ \frac{1}{2}\right\rangle$$

が得られる．初めに原子が状態 $|1\ \frac{1}{2}\rangle$ にあるならば，シュレーディンガー方程式の積分について§10で述べた自明な場合になる．原子は時間が経過してもこの状態にとどまり，状態ベクトルには単に位相因数 $\exp\left[-\mathrm{i}A\hbar\int_{t_0}^{t}\left(\frac{1}{2}-2\rho(\tau)\right)\mathrm{d}\tau\right]$ が掛けられるだけである．磁場が線形に変わる場合（法則 (62)），時間 T の終りにおける状態ベクトルは厳密に

$$\exp(-\mathrm{i}A\hbar T)\left|1\ \ \frac{1}{2}\right\rangle$$

に等しい．このことはどのような T についても成り立つ．特に $A\hbar T\ll 1$ となる極限において，瞬間近似によって得られた結果，すなわちベクトル $|1\ \frac{1}{2}\rangle$ そのものがもう一度見いだされる．

今度は $M_J=1/2$ の場合を調べる．この J_z の値に対する H の固有状態は二つあり，それらはベクトル $|0\ \frac{1}{2}\rangle$ と $|1\ -\frac{1}{2}\rangle$ の線形結合である．これら二つのベクトルによって張られる空間のなかで $H(t)$ の固有値問題を解くために，これらのベクトルを基底にとる．このとき $H(t)$ を表わす行列は，計算の結果

$$A\hbar^2\begin{pmatrix} -\rho & \frac{1}{2}\sqrt{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

となる．

パウリ行列 $\boldsymbol{\sigma}\equiv(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を導入すれば，この行列はつぎのように特に便利な形に書き表わされる：

$$H(t)=\frac{1}{4}A\hbar^2[(-2\rho-1)+(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma})], \tag{115}$$

ただし $\boldsymbol{b}$ は

$$b_x=2\sqrt{2}, \qquad b_y=0, \qquad b_z=1-2\rho$$

を成分とするベクトルである．また $\boldsymbol{b}$ 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{u}$ を導入する．すなわち

$$\boldsymbol{b}=b\boldsymbol{u}, \qquad b=\sqrt{8+(1-2\rho)^2}, \qquad \boldsymbol{u}\equiv\left(\frac{2\sqrt{2}}{b}, 0, \frac{1-2\rho}{b}\right). \tag{116}$$

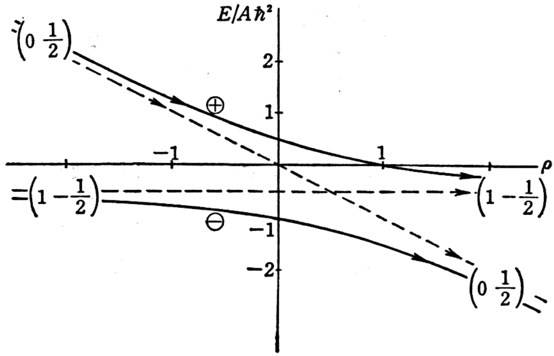
ベクトル $\boldsymbol{b}$ とベクトル演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ は一つの3次元空間のベクトルであるが，普通の空間とは何の関係もないということに十分注意する必要がある．ここで普通の空間において用いるのと用じような幾何学的推論により，いくつかの性質を証明することができるが，それは単に数学的技巧の問題である．

(115) と (116) から

$$H(t)=\frac{1}{4}A\hbar^2[(-1-2\rho)+b(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})] \tag{117}$$

が導かれる．それゆえ $H(t)$ は演算子 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$ の関数である．その固有値問題はこの事実から容易に解決される．固有値は $A\hbar^2(-1-2\rho\pm b)/4$ であり，射影子は $P_\pm=(1\pm(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u}))/2$ である．これらに対応する固有軸を $|+\rangle$ と $|-\rangle$ で表わそう．これは位相因数を除いて定まり，条件 (106) の第1式を使えば位相因数も固定されるが，今後の議論には関係のないことであるから，これについては気に掛けないことにする．このように決められた二つの準位と射影子をパラメータ $\rho(t)$ の関数とみなし，それらの変化を連続性によって追跡するのは容易である (17·3図と17·4図)．ρ が $-\infty$ から $+\infty$ まで動くとき，固有軸 $|+\rangle$ は位相因数を除いて $|0\,\frac{1}{2}\rangle$ から $|1\ -\frac{1}{2}\rangle$ へ移り，対応するエネルギー準位は17·4図に示した双曲線の上の分枝に沿って動く．このあいだに，固有軸 $|-\rangle$ は $|1\ -\frac{1}{2}\rangle$ から $|0\,\frac{1}{2}\rangle$ へ移り，対応する準位は上記の双曲線の下の分枝に沿って動く．

具体的に考えるために，最初に系が状態 $|0\,\frac{1}{2}\rangle$ にあったとする．場の反転が十分緩やかに行なわれるならば，系の状態ベクトルは (位相因数を除いて) いつもベクトル $|+\rangle$ に等しく，場の反転が終ったときには，はっきりと状態 $|1\ -\frac{1}{2}\rangle$ に見いだされる．この断



17·4図 磁場を反転させるとき，二つの ^2P 準位，$M_J = 1/2$ の受ける変化（17·3 図と同じ記号による）．実線は断熱反転，破線は瞬間的反転

熱移行が成り立つための判定条件を定めるには，前の §13 の考えを適用すればよい．§13 の記号を使えば，

$$\eta_+ = p_{+\to-} \lesssim \max\left|\frac{\alpha(t)}{\omega(t)}\right|^2 \ll 1 \qquad (118)$$

となり（関係（112）），$\omega(t)$ は遷移 $+ \to -$ に関するボーア振動数，すなわち

$$\omega(t) = \frac{1}{2}A\hbar b = \frac{1}{2}A\hbar\sqrt{8+(1-2\rho)^2}$$

であり，$\alpha(t)$ は固有軸 $|+\rangle$ の速度の $|-\rangle$ 方向への射影である．したがって

$$|\alpha(t)| = \left|\langle -|\frac{\mathrm{d}P_+}{\mathrm{d}t}|+\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\langle -|\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t}\right)|+\rangle\right|.$$

また $\mathrm{d}\boldsymbol{u}/\mathrm{d}t$ は $\boldsymbol{u}$ に垂直なベクトルであり，$|+\rangle$ と $|-\rangle$ は $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$ の固有ベクトルであるから，

$$|\alpha(t)| = \frac{1}{2}\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t}\right| = \frac{\sqrt{8}}{8+(1-2\rho)^2}\left|\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}\right|$$

が成り立つ (*).

場の反転が線形法則（62）にしたがって行なわれる場合，$|\alpha/\omega|$ は $\rho = +1/2$ のとき最大値に達する．すなわち

$$\max\left|\frac{\alpha}{\omega}\right| = \frac{1}{2}\frac{\mu_B\mathscr{H}_0}{A\hbar^2} \times \frac{1}{A\hbar T}.$$

(*) ［訳注］ $\boldsymbol{u} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$ と置いて，行列 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$，$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{u}/\mathrm{d}t)$ を計算すればわかる．

それゆえ条件 (118) が満たされるのは，

$$T' \equiv \frac{2A\hbar^2}{\mu_B \mathscr{H}_0} T \gg \frac{1}{A\hbar} \tag{119}$$

のときである．T' は磁場との相互作用のエネルギー $\mu_B \mathscr{H}$ が $-2A\hbar^2$ から $2A\hbar^2$ に移るために必要な時間である．固有軸 $|+\rangle$ が $|0\ \frac{1}{2}\rangle$ の位置から $|1\ -\frac{1}{2}\rangle$ の位置まで回転するのは，実質的にはこの時間間隔である．条件 (119) は，遷移 $|+\rangle \rightarrow |-\rangle$ を特徴づける時間 $1/A\hbar$ にくらべて上記の時間が長くなければならないということを表わす．

断熱移行に関するこの条件を急激な移行に関する条件 (64) とくらべるのは興味深い．事実後者は強すぎる制限を表わす．場の反転がつづいている時間 T を通じて状態ベクトルが事実上変わらないためには，この条件が必要である．それにもかかわらず，上に定義した時間間隔 T' を除けば，ハミルトニアンの固有軸は事実上固定されており，系の状態ベクトルにはただ位相因数が掛けられるだけである．本来の意味の力学的状態が一定であるためには，言いかえると，場の反転が行なわれるあいだ状態ベクトルが位相を除いて同じであるためには，急激な移行の条件が時間 T' のあいだ満たされていればよい．すなわち

$$T' \ll (1/A\hbar) \tag{120}$$

ならば十分である (問題 8 を参照)．

演習と問題

1. ある系のハミルトニアン H_0 の一つの準位が 2 重に縮退しているとき，この準位に対する二つの直交固有状態を u_1, u_2 とする．時間によらないある摂動 V を導入すると，縮退が除かれ，上記の準位は ε の距離をへだてた二つの準位に分かれるとする．系は初めに状態 u_1 にあったとし，摂動 V を時間間隔 T のあいだだけ導入したとする．この摂動が働き終ったのち，系が状態 u_2 に見いだされる確率を $W_{1\to2}$ とする．$W_{1\to2}$ は T の周期関数で，角振動数は $\varepsilon/\hbar$ であることを示せ．また，$\varepsilon T \ll \hbar$ となる極限において，第 1 次摂動の理論によって与えられた結果を得る．このことを確かめよ．任意の T に対して $W_{1\to2}$ が 0 になるためには，どんなことが必要か．

2. 水素原子が振動する電場 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$ のなかにあり，場の角振動数 ω は原子のイオン化振動数 $me^4/2\hbar^3$ より大きい．初めに原子が基底状態にあるとき，イオン化状態に移る単位時間あたりの確率はいくらか (イオン化状態を表わす波動関数は平面波と同一視できると仮定しよう)．このような原子の励起の過程で放出される電子の方向分布はどうか．［注意；この問題で述べたメカニズムは光電効果のメカニズムであり，これについては電磁場を量子化しない半古典的な取り扱い方がある．得られる結果は，量子化された電磁場による正確な取り扱いから得られるものと同じである (第 21 章，問題 12 を参照)．］

3. β 崩壊において，原子核が一つの電子を放出するとき，その速さは多くの場合 c に

近く，原子核の電荷は Ze から $(Z+1)e$ に移る．この核のまわりにいる電子に対してこの変換がおよぼす効果は，瞬間近似によって取り扱いうることを示せ．三重水素 H^3（≡1陽子＋2中性子）から He^3（≡1中性子＋2陽子）への崩壊においては，崩壊電子の運動エネルギーは平均 16 keV ($mc^2 = 500$ keV) 程度にすぎないが，この場合にも同じ方法が適用されることを確かめよ．初めに三重水素原子が基底状態にあるとき，崩壊後の He^+ イオンが 1s 状態に見いだされる確率はいくらか．2s 状態，$l \neq 0$ 状態に見いだされる確率はそれぞれいくらか．

4. ある非保存系のハミルトニアンを $H(t)$ とする．方程式 $H(t)|u\rangle = \varepsilon(t)|u\rangle$ を満たし，時刻に無関係なベクトル $|u\rangle$ が存在すると仮定する．ベクトル

$$\exp\left(-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t} \varepsilon(\tau)\mathrm{d}\tau/\hbar\right)|u\rangle$$

がこの系のシュレーディンガー方程式を満たすことを示せ．

5. $P_1, P_2, \cdots, P_j, \cdots$ は直交する射影子の完全列であるとする．これらはすべてパラメータ s の連続で微分可能な関数であるが，s とともに変化しても直交関係と完全性関係

$$P_j P_k = \delta_{jk} P_k, \qquad \sum_j P_j = 1$$

は保たれるとする．演算子 $K(s) \equiv \mathrm{i}\hbar \sum_j (\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s) P_j \equiv -\mathrm{i}\hbar \sum_j P_j (\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s)$ はエルミートで，交換関係 (75) にしたがうことを示せ．これらはまたつぎの恒等式を満たすことを示せ．

$$P_j K P_j = 0 \qquad (j = 1, 2, \cdots)$$
$$P_j K P_k = \mathrm{i}\hbar P_j (\mathrm{d}P_k/\mathrm{d}s) P_k = -\mathrm{i}\hbar P_j (\mathrm{d}P_j/\mathrm{d}s) P_k.$$

6. $P_j(s)$ $(j = 1, 2, \cdots)$ の定義は前問のとおりとする．$\varepsilon_j(s)$ を s の微分可能な関数とするとき，演算子

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s) P_j(s)$$

の導関数は方程式

$$P_j (\mathrm{d}H/\mathrm{d}s) P_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_j) P_j (\mathrm{d}P_k/\mathrm{d}s) P_k + \delta_{jk} (\mathrm{d}\varepsilon_k/\mathrm{d}s) P_k$$

を満たす．このことを示せ．このことから，(109) によって定義された《角速度》$\alpha_{ji}(t)$ はまた関係

$$\alpha_{ji}(t) = \frac{-1}{\hbar\omega_{ji}(t)}\, {}_t\!\left\langle j \left| \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} \right| i \right\rangle_t \qquad (j \neq i)$$

によって与えられることを導け．

7. 大きさが一定の一様な磁場 $\mathcal{H}$ が，これと定角 θ をつくる軸のまわりに，定角速度 α で回転する．この場のなかに，スピン $\boldsymbol{J}$ をもつ無限に重い粒子を置く．$\hbar = 1$ と置き，磁場に平行な単位ベクトルを $\boldsymbol{u}(t)$ で表わし，またこの粒子の磁気回転比を μ で表わして，$\gamma = \mu\mathcal{H}$ と置く．このときスピン $\boldsymbol{J}$ の運動はハミルトニアン $H(t) = -\gamma(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{u})$ に支配される．$t = 0$ を初期時刻とし，$\boldsymbol{J}$ の $\boldsymbol{u}(0)$ 方向の成分を J_0，場の回転軸方向の成分を J_z で表わす．

《回転軸表示》に移すユニタリ演算子をつくれ．つぎに，シュレーディンガー表示による時間的変化の演算子はつぎの式によって厳密に与えられることを示せ：

$$U(t) = \exp(-\mathrm{i}\alpha J_z t)\exp[\mathrm{i}(\gamma J_0 + \alpha J_z)t].$$

この例について断熱定理を確かめよ．直接の計算と §13 の方法により，断熱近似が成り立つための判定条件は $(\alpha \sin\theta/\gamma)^2 \ll 1$ であることを示せ．

8. §14 で定義した系のシュレーディンガー方程式を $M_j = 1/2$ の場合に考える．この §14 で定めた表現におけるその解の成分を $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ とする．便宜上 $t_0 = -T/2$ にとり，

$$T' = 2A\hbar^2 T/\mu_{\mathrm{B}}\mathscr{H}_0(\ll T), \qquad \kappa = 4/A\hbar T'$$

と置く．つぎの式が成り立つことを示せ：

$$u = y\exp(-\mathrm{i}\kappa\xi^2), \qquad v = \mathrm{i}(\mathrm{d}y/\mathrm{d}\xi)\exp(-\mathrm{i}\kappa\xi^2).$$

ただし y は変数 $\xi = A\hbar t/\sqrt{2}$ の関数として，微分方程式

$$y'' - \frac{1}{2}\mathrm{i}(\sqrt{2} + 4\kappa\xi)y' + y = 0$$

にしたがうものとする．$x = \xi + (\sqrt{2}/4\kappa)$ と置けば，この方程式の一般解は

$$y = A_0 F\left(\frac{\mathrm{i}}{4\kappa}\middle|\frac{1}{2}\middle|\mathrm{i}\kappa x^2\right) + A_1 x F\left(\frac{1}{2} + \frac{\mathrm{i}}{4\kappa}\middle|\frac{3}{2}\middle|\mathrm{i}\kappa x^2\right)$$

という形に書き表わされる．初期状態を $|0\ \tfrac{1}{2}\rangle$ とするとき，超幾何関数の漸近式を使って，時間 T の終りに系が同じ状態に見いだされる確率 ϖ は

$$\varpi = \left(\frac{1-\gamma}{1+\gamma}\right)^2, \qquad \gamma = \tanh\frac{\pi}{4\kappa}$$

という式 $[T \gg (T'/A\hbar)^{1/2}$ のとき成り立つ$]$ によって与えられることを示せ．条件 (119) と (120) はそれぞれ断熱移行と急激な移行の条件にうまく対応することを確かめよ．

第18章　変分法とそれに関連した問題

§1.　リッツの変分法

応用範囲がごく限られている WKB 法は別として，とびとびのスペクトルをもつエネルギー準位と波動関数を近似的に決定する方法は本質的に二つある．それは摂動論（第16章）と変分法である．本章はこれら二つの方法のうち二番目のものに当てられる．

この第二の近似解法はきわめて一般的なものであり，解くべき方程式が変分形式に書き表わされるときにはいつでも利用できる．その原理はつぎのとおりである．求める解はある一つの関数空間 $\mathscr{F}$ に属する．この空間に属する任意の関数を Ψ で表わす．いま調べている方程式の解は，ある汎関数 $Q[\Psi]$ に停留値を与えるような $\mathscr{F}$ の関数であると仮定する．その結果この方程式は変分方程式

$$\delta Q = 0 \tag{1}$$

に同値となる．リッツの変分法は $\mathscr{F}$ よりも狭い関数領域 $\mathscr{F}'$ に属する関数のなかから，方程式 (1) の解を求めることにある．

たとえば，与えられた量子系の波動関数全部から成る集合が $\mathscr{F}$ であるとしよう．いくつかの連続なパラメータ $a, b, \cdots$ によってしるしづけられる特殊な波動関数を $\Phi(a, b, \cdots)$ で表わす．関数 Φ から成る集合を $\mathscr{F}'$ としてとることができる．Φ の汎関数とみなせば，量 Q は単に変分パラメータ $a, b, \cdots$ の関数，すなわち

$$q(a, b, \cdots) \equiv Q[\Phi(a, b, \cdots)]$$

になってしまう．この関数が停留値をとるような値の組 $a_0, b_0, \cdots$ はいずれも方程式 (1) の近似解 $\Phi_0 \equiv \Phi(a_0, b_0, \cdots)$ を定める．

この方法がうまくゆくかどうかは，試験関数 (*) の空間 $\mathscr{F}'$ をどう選ぶかによって本質的に決まる．やさしい計算に適するように，試験関数はできるだけ簡単なものにしなければならない．他方，こうして得られる解が厳密な解に十分近くなるように，これらの関数の変域はできるだけ広くとるか，または十分適切に選ばなければならない．

実際の場合，Q の停留値ははっきり決まった物理的意味をもつ．変分法の主な長所の一つは，この値に関する特に正確な評価を自動的に与える点である．事実，近似解 Φ_0 が

(*)［訳注］原文は fonction d'essai. $\mathscr{F}'$ に属する関数（の一般形）を“試験関数”と言うことにしておく．

厳密解 Ψ_0 に近くなるほど $Q[\Phi_0]$ と $Q[\Psi_0]$ の差が小さくなることはいうまでもない．しかしまた，$Q[\Psi]$ は点 $\Psi=\Psi_0$ において停留値をとるから，この差は Φ_0 と Ψ_0 の差よりも高位の無限小である．変分法はまた何よりも，停留汎関数という形に表わされるいろいろな量を評価するために用いられる．特に束縛状態のエネルギー準位を求める場合がそれである．第19章において，衝突の振幅を計算するためにもこの方法が適用されるのを見るであろう．

とびとびのスペクトル準位を計算する変分法は，この章の第I節で説明され，議論される．残りの二つの節では，直接あるいは間接に変分法と関係のある方法によって，二つの重要な問題を取り扱う．すなわちハートリーの方法とフォック＝ディラックの方法を用いて，中心力場の近似による複雑な原子の波動関数を決定すること（第II節），およびボルン＝オッペンハイマーの断熱近似による分子の取り扱い（第III節）である．

I．束縛状態を決定するための変分法

§2. 固有値問題の変分形式

束縛状態を決めるための変分法に入ってくる停留汎関数はエネルギーの平均値である．実際つぎの基本定理が成り立つ [1]．

定理． 一つの量子系のハミルトニアンを H で表わし，そのエネルギーの平均値を $E[\Psi]$ とする．すなわち

$$E[\Psi]\equiv\frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}. \qquad (2)$$

これを状態空間のベクトルの汎関数とみなすとき，これに停留値を与えるベクトルはいずれも H のとびとびのスペクトルに属する固有ベクトルであり，逆も成り立つ．また，対応する固有値は汎関数 $E[\Psi]$ の停留値である．

ここに導入されたベクトル $|\Psi\rangle$ はノルム有限のベクトルであり，関数空間 $\mathscr{F}$（§1の定義）は系のすべての力学的状態から成るヒルベルト空間であることに十分注意する必要がある．それゆえこの定理によって，ヒルベルト空間のなかにある H の固有解は変分方程式

$$\delta E=0 \qquad (3)$$

(1) 実際には，ヒルベルト空間におけるエルミート演算子のとびとびのスペクトルに関する一般的な結果が取り扱われる．事実，このあとの証明に使われるのは H のエルミート性だけである．

の解であることが言い表わされている．

さらに，汎関数 $E[\Psi]$ は $|\Psi\rangle$ のノルムと位相に無関係であることに注意する．したがって，$|\Psi\rangle$ のノルムまたは位相にどのような付加条件を課しても，定理の正しさは変わらない．$|\Psi\rangle$ の変域をノルム1のベクトルに制限するととりわけつごうがよい．この制限は本章を通じてどの例を取り扱うときにも付け加えることにする．

定理の証明

汎関数 $E[\Psi]$ の変分を計算すると，

$$\begin{aligned}\langle\Psi|\Psi\rangle\delta E &= \delta(\langle\Psi|H|\Psi\rangle) - E\delta(\langle\Psi|\Psi\rangle)\\ &= \langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle\end{aligned}$$

となる．$\langle\Psi|\Psi\rangle$ は有限であるが0でないから，方程式 (3) は

$$\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0 \tag{4}$$

に同値である．ケット $|\delta\Psi\rangle$ は $|\Psi\rangle$ の変分であり，ブラ $\langle\delta\Psi|$ は $|\Psi\rangle$ の共役ブラの変分であるから変分 $|\delta\Psi\rangle$ と $\langle\delta\Psi|$ は独立ではない．それにもかかわらず，これらを独立であるように考えることができる．実際，方程式 (4) が成り立つためにはケット $|\delta\Psi\rangle$ は無限小でなければならないが，このことを除けば任意である．この方程式において $|\delta\Psi\rangle$ を $\mathrm{i}|\delta\Psi\rangle$ に置き換えれば，新しい方程式

$$-\mathrm{i}\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle + \mathrm{i}\langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0 \tag{4'}$$

が得られる．二つの変分方程式〔系〕(4)，(4′) から，線形結合によってこれと同値なつぎの二つの方程式〔系〕が導き出される：

$$\langle\delta\Psi|(H-E)|\Psi\rangle = 0, \qquad \langle\Psi|(H-E)|\delta\Psi\rangle = 0.$$

方程式 (4) において変分 $|\delta\Psi\rangle$ と $\langle\delta\Psi|$ は任意で互いに独立なものとみなすことにすれば，上の方程式〔系〕はただ一つの方程式 (4) に同値である [2]．

このことから二つの関係

$$(H-E)|\Psi\rangle = 0, \qquad \langle\Psi|(H-E) = 0$$

すなわち

$$(H-E[\Psi])|\Psi\rangle = 0 \tag{5a}$$

$$(H^{\dagger}-E^{*}[\Psi])|\Psi\rangle = 0 \tag{5b}$$

が導き出される．しかし，H はエルミート $(H=H^{\dagger})$ なのであるから，関係式 (5a) と (5b) は同じものである．それゆえ方程式 (3) は方程式 (5a) に同値である．すなわち，E に停留値を与えるケット $|\Psi_1\rangle$ はすべて H の固有ケットであり，固有値 $E[\Psi_1]$ に対

(2) この規則は一般に成り立つ．すなわち，方程式 (4) が $|\delta\Psi\rangle$ と $\langle\delta\Psi|$ に関する線形の関係式であること，およびブラとケットの対応が反線形であることからこの結果が出てくる．

応する．

逆に，ノルムの有限な固有ケットを $|\Psi_1\rangle$ とし，対応する固有値を E_1 とする．すなわち

$$H|\Psi_1\rangle = E_1|\Psi_1\rangle.$$

この等式の両辺に左から $\langle\Psi_1|$ を掛けて内積をとれば，

$$E_1 = E[\Psi_1]$$

となり，その結果 $|\Psi_1\rangle$ は方程式 (5a) を満たす．H はエルミートで E_1 は実数であるから，方程式 (5b) も成り立つ．したがって $E[\Psi]$ は $\Psi = \Psi_1$ において確かに停留値をとる．　　　　(証明終)

この基本定理を補うものにつぎの補助定理がある．

補助定理． 一つの系のどんな力学的状態をとっても，そのエネルギーの平均値は基底状態の固有エネルギーより小さくはない．すなわち

$$E[\Psi] \geqslant E_0. \tag{6}$$

この不等式を証明するには，H を対角型にする一つの表現において，両辺の差を計算すればよい．書き方を簡単にするために，H のスペクトルは完全にとびとびであると仮定する．エネルギー準位を低い方から順に並べたものを $E_0, E_1, \cdots, E_n, \cdots$ とし，それらの部分空間への射影子をそれぞれ $P_0, P_1, \cdots, P_n, \cdots$ とする．1の分解の関係を適用すれば，

$$E[\Psi] - E_0 \equiv \frac{\langle\Psi|(H-E_0)|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sum_{n=1}^{\infty}(E_n - E_0)\frac{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

を得る．この和の各項は必ず正または0であるから，和そのものも同様であり，不等式 (6) が証明される．

§3.　とびとびの準位の変分計算

§1で述べた一般的な筋書きにしたがえば，ベクトル $|\Psi\rangle$ の変域を力学的状態から成る空間の一部分だけに制限することにより，変分方程式 (3) の近似解が得られる．この部分領域 $\mathcal{F}'$ をうまく選ぶならば，H のいくつかの固有ベクトルが良い近似で得られ，それらに対応するエネルギーの固有値はもっと良い近似で得られる．

この方法が特に簡単な形になるのは，試験関数が変分パラメータに対して線形に依存するとき，言いかえれば，領域 $\mathcal{F}'$ そのものもまたベクトル空間となる場合である．このとき $\mathcal{F}'$ は状態空間の部分空間である．ここで部分空間という言葉は普通の意味（第7章，§2）に用いている．

$\mathcal{F}'$ への射影子を P で表わし，この空間の任意のベクトルを Φ，この空間への系のハ

ミルトニアンの射影を H_P とする．すなわち

$$H_P \equiv PHP. \tag{7}$$

$E[\Phi]$ の式（定義 (2)）は H_P の平均値に等しい．一方，演算子 H_P はエルミートであり，$\mathscr{F}'$ のベクトルを同じ $\mathscr{F}'$ のベクトルに線形に変換する．すなわち $\mathscr{F}'$ のエルミート演算子である．この性質によって，§2の基本定理は H_P にも適用される．それゆえ変分方程式

$$\delta E[\Phi] = 0 \tag{8}$$

は固有値方程式

$$H_P \Phi = E\Phi \tag{9}$$

に同値である．つまり，この場合の変分近似は H の固有値問題を同じ型の問題に置き換えるのであるが，問題を取り扱う空間 $\mathscr{F}'$ がまえより狭いため，原理上解きやすくなるわけである．

摂動法（第16章，§8）との類似に注意する．特に，摂動のないハミルトニアンの固有値の一つに対応する部分空間を $\mathscr{F}'$ にとるとき，変分法によって与えられる準位は，第1次摂動の計算によって得られる準位といつでも同じである．

§4. 簡単な例：水素原子

変分法について議論し，その長所と短所を評価するまえに，この方法にいくらかなじんでおくとつごうがよい．そのため，水素原子の基底準位の計算にこれを適用し，出てくる結果を厳密な結果（第11章）とくらべてみよう．

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}, \qquad E_H = \frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 mc^2, \qquad \rho = \frac{r}{a_0}$$

と置く．われわれははっきり決まった角運動量 $(l\,m)$ をもつ固有状態を決定したいのであるから，試験関数として，

$$\Phi = a_0^{-3/2}\,\frac{u(\rho)}{\rho}\,Y_l^m(\theta, \varphi)$$

の形のものをとる．簡単な計算によって

$$E[\Phi] = -E_H\left[\int_0^\infty u^*\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho}\right)u\,\mathrm{d}\rho \Big/ \int_0^\infty |u|^2\mathrm{d}\rho\right]$$

が得られる．

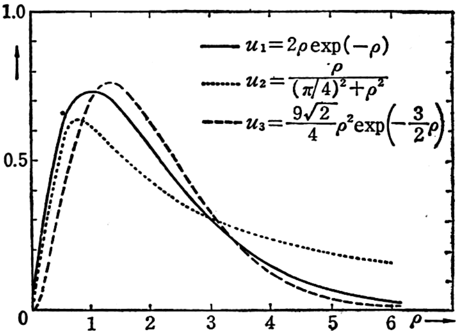
問題を s 状態 $(l = m = 0)$ に限定してエネルギーの停留値を計算するが，この際 u の変域として異なるものを三つ選んでみる．すなわち

$$u_1 = \rho\,\mathrm{e}^{-b\rho}, \qquad u_2 = \frac{\rho}{b^2 + \rho^2}, \qquad u_3 = \rho^2\,\mathrm{e}^{-b\rho}$$

18·1表　水素原子の基底状態の変分計算

		1	2	3
$u(b,\rho)$	=	$\rho\,\mathrm{e}^{-b\rho}$	$\dfrac{\rho}{b^2+\rho^2}$	$\rho^2\,\mathrm{e}^{-b\rho}$
N^2	=	$1/4b^3$	$\pi/4b$	$3/4b^5$
$E(b)/E_H$	=	b^2-2b	$(\pi-8b)/2\pi b^2$	$\dfrac{1}{3}b^2-b$
$b_{\mathrm{min.}}$	=	1	$\dfrac{\pi}{4}$	3/2
$E_{\mathrm{var.}}$	=	$-E_H$	$-0.81\,E_H$	$-0.75\,E_H$
$\dfrac{E_{\mathrm{var.}}-E_0}{E_1-E_0}$	=	0	0.25	0.33
$(u/N)_{\mathrm{var.}}$	=	$2\rho\mathrm{e}^{-\rho}$	$\rho\left[\left(\dfrac{\pi}{4}\right)^2+\rho^2\right]^{-1}$	$\dfrac{1}{4}9\sqrt{2}\rho^2\mathrm{e}^{-3\rho/2}$
$\langle r\rangle_{\mathrm{var.}}$	=	$1.5a_0$	∞	$1.66a_0$
$\varepsilon=1-\lvert\langle\Psi_0\vert\Psi_{\mathrm{var.}}\rangle\rvert^2$	=	0	0.21	0.05

これらの試験関数はいずれもただ一つのパラメータ b を含むから，どの場合にも $E[\Phi]$ は b の関数になり，変分計算はこの関数の最小値を求めることになる．この計算にむずかしいところはない．結果を18·1表に示す．この表では，まず試験関数のノルム $N^2\equiv\langle\Phi|\Phi\rangle$ とエネルギーの平均値を b の関数として解析的に表わす式が与えられる．ついで最小になる点 $b_{\mathrm{min.}}$ と最小値 $E_{\mathrm{var.}}$ が与えられる．$E_{\mathrm{var.}}$ を基底エネルギー $E_0=-E_H$ とくらべるがよい．近似解 $\Psi_{\mathrm{var.}}$ を基底状態の固有関数 Ψ_0 と比較するのもまた興味深い．そのため，1に規格化した動径部分 $(u/N)_{\mathrm{var.}}$ の解析的な式を18·1表に与え，それ



18·1図　§4の変分計算によって与えられる水素原子の基底状態の（1に規格化された）動径関数．

らのグラフを18･1図に書いておく．これらを厳密な動径関数 $2\rho e^{-\rho}$ とくらべることが必要である．表にはまた，三つの近似解 $\Psi_{\text{var.}}$ のそれぞれに対する平均値 $\langle r\rangle_{\text{var.}}$ のほか，

$$\varepsilon \equiv 1 - |\langle\Psi_0|\Psi_{\text{var.}}\rangle|^2$$

の大きさ（Ψ_0 と $\Psi_{\text{var.}}$ は1に規格化されているとする）が含まれる．ε は状態 $\Psi_{\text{var.}}$ と基底状態とのへだたりを測るのにつごうのよい尺度である（これは Ψ_0 に垂直な方向に対する $\Psi_{\text{var.}}$ の成分の大きさを二乗したものである）．ここに選んだ三つの試験関数と基底状態の波動関数とのあいだには，動径部分に節をもたないという共通点がある．それゆえ，これらの試験関数は励起状態の波動関数の近くにあるよりも，基底状態の波動関数の近くにある可能性がずっと強い．また，$E_{\text{var.}}$ の値はどんな励起準位の近くにあるよりも，基底準位 $-E_H$ の近くにある可能性がずっと強い（第1励起準位：$E_1 = -E_H/4$）．この予想は確かに正しい．それを示すために，18･1表では $E_{\text{var.}}$ の各値の下に，これに対応して比 $(E_{\text{var.}} - E_0)/(E_1 - E_0)$ がとる値を書いておいた．この値は基底準位の変分計算によって生じる誤差を測るのにつごうのよい尺度である．最良の結果を与えるのは試験関数 u_1 である．これによれば基底状態の波動関数そのものと厳密な固有値が得られる．u_1 は s 状態の固有関数と原点において同じ挙動（$\propto \rho$）をとり，漸近的にも同じ減少指数関数の挙動をとることに注意する（クーロン・ポテンシャルと異なる引力ポテンシャルの場合は，もはや厳密な波動関数は得られないが，それでもなお結果はすぐれたものになるであろう）．関数 u_2 は原点で良い挙動を示すが，漸近的な挙動は厳密解とまったく違う．それでも u_2 から得られる値 $E_{\text{var.}} = -0.81\,E_H$ はきわめて満足すべきものである．関数 u_3 はこれに反し，原点では非常に不正確な挙動（$\propto \rho^2$）を示し，無限遠においては正確な指数関数的減少を示すが，u_3 から得られる結果は u_2 のときよりも悪い．$\langle r\rangle_{\text{var.}}$ と ε の大きさを調べればわかるように，関数 u_3 は関数 u_2 よりも，大局的には厳密解に近い．〔それにもかかわらず〕u_3 が良くない結果を与えるという事実は，エネルギー計算における原点付近の挙動の重要さ，ポテンシャルのもつ引力の性格に由来する重要さをはっきり示している．

§5.　議論．励起準位の計算に対する変分法の適用

変分法はとりわけ強力な一つの方法であるが，その結果の適用範囲を評価するのがむずかしい．

この方法によって与えられる近似値がどのような水準まで達しているかを知りうる厳密な理論はなく，それゆえ当然のことながら，生じた誤差の大きさの程度を評価できる厳密な理論もない．それにもかかわらず，第一の問題に対してはしばしば一つの解答を与えることができる．そのためには，得られた波動関数 $\Psi_{\text{var.}}$ の一般的な性質（節の個数，原点

および無限遠における挙動）を厳密解の性質，あるいは少なくとも，厳密解について原理上知られている性質と比較するのである．実際の場合，選ばれる試験関数は簡単な解析的形式をもっている．これらがもつ振動（すなわち節）の個数はごく限られている．それゆえ，これらが基底状態の近くにある可能性は十分にある．

上に述べた議論から示されるように，変分法は何よりもまず基底準位の計算に適し，これに対して上の限界を与える（補助定理（6））．残念ながら，誤差の大きさの程度を評価する方法は一つもない（問題1を参照）．すべては試験関数の選び方とその変化の自由度，言いかえれば関数領域 $\mathscr{F}'$ の選び方とそのひろがりによって決まる．

励起準位を計算するときには，いっそう複雑な試験関数を必要とすること，結果の解釈のむずかしさ，特に誤差の大きさと符号の評価のむずかしさがあるため，変分法の適用にはずっと多くの冒険的要素が加わる．それにもかかわらず励起準位の計算に対してこの方法が役に立つ場合が二つある．

第一に，基底状態の波動関数 Ψ_0 が知られているときには，試験関数 Φ を Ψ_0 に直交する波動関数のなかにとることができる．この場合，汎関数 $E[\Phi]$ の最小値は第1励起状態のエネルギー E_1 に等しい．すなわち

$$E[\Phi] \geqslant E_1 \tag{10}$$

であるから，変分法の適用によって準位 E_1 の上の限界が与えられる（問題2を参照）．正確な基底解が知られなくても，その近似解 Φ_0 が知られている（たとえば変分計算によって決められている）という場合もありうる．この場合，Φ_0 と Ψ_0 の差が十分小さい，すなわち

$$\varepsilon_0 = 1 - |\langle \Psi_0 | \Phi_0 \rangle|^2 \ll 1$$

（Ψ_0 と Φ_0 のノルムは1とする）という条件のもとに，Φ_0 に直交する試験関数から出発して，E_1 の計算に変分法を適用することができる．停留解 Φ_1（このノルムは1に等しいとする）はこの際 Ψ_0 に直交しないため，不等式（10）の破れる恐れが生じるが，必ず

$$|\langle \Phi_1 | \Psi_0 \rangle|^2 < \varepsilon_0, \tag{11}$$

したがって

$$E[\Phi_1] \geqslant E_1 - \varepsilon_0 (E_1 - E_0) \tag{12}$$

が成り立つ（問題3）．

つごうのよい場合の第二は，H がある対称性をもつときである．具体的に考えるため，H は回転により不変であると仮定する．このとき固有関数と固有値は量子数 j, m により分類できる．角運動量 (jm) をもつ関数の空間を $\mathcal{E}(jm)$ とする．試験関数を $\mathcal{E}(jm)$ のなかから選べば，変分によって準位 (jm)，特にそのうちの最低のものを計算すること

ができる．この値により，変分法は自動的に上の限界を与える（問題 4）．

§6. ヘリウム原子の基底状態

この§6 では，He 原子の基底準位およびもっと一般に Li^+，Be^{++} などのような $(Z-2)$ 重にイオン化した原子の基底準位を変分計算によって決定しよう．すでに同じ問題を第 16 章 §4 では摂動法によって取り扱った．特に断わらない限り，ここでも同じ記号を使おう．

試験関数としてとるのは，摂動計算における 0 次の関数

$$\Phi_a(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\pi a^3} \mathrm{e}^{-(r_1+r_2)/a}$$

と同じ関数である．ただ一つの違いは，a に値 a_0/Z を与える代りに，これを変分パラメータとして扱う点にある．

選ばれた試験関数はノルム 1 であるから，エネルギーの平均値は式

$$E(a) = \langle \varphi_a | H | \varphi_a \rangle = \iint \varphi_a^* (H\varphi_a) \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2$$

によって簡単に与えられる．この系のハミルトニアンは

$$H = k_1 + k_2 + v_1 + v_2 + V_{12}$$

の形に書かれ，k_i $(i = 1, 2)$ は各電子の運動エネルギー，$v_i = Ze^2/r_i$ は電子と核との相互作用，V_{12} は電子のあいだの相互作用である．それゆえ，$E(a)$ はこれら 5 個の演算子の平均値の和である．つぎのことに注意するとこれら 5 個の量の計算は非常にやさしくなる．すなわち，波動関数 φ_a は $\varphi_a = f_a(\boldsymbol{r}_1) f_a(\boldsymbol{r}_2)$ という形に書かれ，

$$Z' = a_0/a$$

と置けば，$f_a(\boldsymbol{r})$ は電荷 $Z'e$ のクーロン場にある 1 電子の基底状態を表わす波動関数である．このような電子の全エネルギーは $-Z'^2 E_H$，運動エネルギーの平均値は $+Z'^2 E_H$，位置エネルギーの平均値は $-2Z'^2 E_H$ であることがわかっている（第 11 章，問題 1）．したがって

$$\langle \varphi_a | k_i | \varphi_a \rangle = Z'^2 E_H, \qquad \langle \varphi_a | v_i | \varphi_a \rangle = -2Z'^2 E_H (Z/Z') = -2ZZ' E_H.$$

他方，第 16 章 §4 の計算法（第 16 章，(17)−(20)）はここでも正しいから，

$$\langle \varphi_a | V_{12} | \varphi_a \rangle = \frac{5}{4} Z' E_H,$$

したがって

$$E(a) = 2E_H \left(Z'^2 - 2\left(Z - \frac{5}{16} \right) Z' \right)$$

が得られる．

この式を a の関数，あるいは同じことであるが Z' の関数とみなせば，

$$Z' = Z - \frac{5}{16} \tag{13}$$

のとき最小値をとる．この最小値は

$$E_{\text{var.}} = -2\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 E_H. \tag{14}$$

He 原子，Li^+，Be^{++} に対する $E_{\text{var.}}$ の数値は第16章 §4 の16·1表（の第5列）に示してある．これらを第1次摂動の計算によって得られた値と比較するのは興味深い．

$$E_{\text{var.}} = -2Z^2 E_H + \frac{5}{4} ZE_H - \frac{25}{128} E_H = E_{\text{pert.}} - \frac{25}{128} E_H,$$

したがっていま求められた値は摂動計算によって得られた値より小さく，その差は Z に無関係な量

$$\frac{25}{128} E_H = 2.64\ \text{eV}$$

であることに注意する．それゆえ，期待にそむかず，この値はいっそう良い近似である．それでもなお $E_{\text{var.}}$ は実験値 $E_{\text{exp.}}$ よりは大きく，不等式 (6) の示すとおりである．

この変分計算によって得られる固有関数には簡単な物理的解釈が与えられる．これは二つの独立な粒子を表わし，これらの粒子が運動するクーロン場の電荷 $Z'e$ は式 (13) によって与えられる．この電荷は核の電荷より $5e/16$ だけ小さい．この近似で上記の差が表わしているのは，各電子が核のクーロン場を動きながら，もう一つの電子が存在することによって受ける遮蔽効果である．

試験関数の変化の可能性を増せば，正確な固有値にいっそう近い $E_{\text{var.}}$ の値を得る．特に，ただ一つの変分パラメータ a に依存する関数 φ_a を試験関数としてとる代りに，r_1，r_2，r_{12} に関する与えられた次数の多項式と φ_a の積を採用し，多項式の係数も a と同じく変分パラメータとして扱うことができる．この多項式を複雑にするほど，$E_{\text{var.}}$ として得られる値は小さくなり，正しい値に近づく．この種の操作を使って，ヒレラース (Hylleraas) は実験値と非常によく一致する理論値に到達した [3]．

---

(3) HYLLERAAS, *Zeit. f. Phys.*, **65** (1930), 209. ヒレラースの処理の詳細は CONDON と SHORTLEY, *Theory of Atomic Spectra*, Cambridge, 第4版, 1957, 345 に述べられている．ヒレラースの方法によればきわめて速い収束が得られる．8個の変分パラメータを使えば，計算値は実験値よりわずかに小さく，不等式 (6) と明らかに矛盾する．事実，$E_{\text{exp.}}$ の値は H の基底準位の固有値 E_0 よりわずかに大きく，これは相対論的効果によるものである．その大きさはまた別に評価することができる．ヒレラースの方法は E_0 の（ごく精密な）計算法であり，$E_{\text{exp.}}$ の計算法ではない．

II. ハートリーの原子とフォック＝ディラックの原子

§7. つじつまの合う場の方法

量子力学における複雑な原子の取り扱いについては，すでに大筋を示してある（第14章，§12および第16章，§9－11）．その出発点となるのは独立な粒子による近似であって，この近似によれば一つ一つの電子が核の引力と他のすべての電子の斥力による平均効果を表わすポテンシャルのなかで，他の電子と無関係に動く．この近似では，原子の波動関数はあるスレーター行列式によって表わされ，この行列式は原子のシュレーディンガー方程式の厳密解にできるだけ近く選ぶのがよい．任意のスレーター行列式を Φ で表わす．最も良い選び方は，試験関数として Φ をとり，変分法によって定められるものを選ぶことである．変分法のうちでもこの特殊な場合はきわめて重要であり，つじつまの合う場の方法と呼ばれる．計算の詳細には立ち入らないで，この方法の主な段階を説明しよう [4]．

この方法の適用範囲は原子だけに限られているのではない．一つの分子あるいは固体の電子，またもっと一般に，どのような外部の場のなかにある同種粒子系でもこの範囲に入る．われわれは議論を原子の場合に限るけれども，以下の説明においては形の上でもこの一般的な性格が保たれる．

§8. $E[\Phi]$ の計算

Z 粒子系のハミルトニアンは

$$H = H_1 + H_2 \tag{15a}$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^{Z} h^{(i)}, \qquad h^{(i)} = \frac{p^{(i)2}}{2m} + V(r^{(i)}) \tag{15b}$$

$$H_2 = \sum_{i<j} w^{(ij)} \tag{15c}$$

と書かれる．第1項 H_1 は運動エネルギーと，外部の場（核の電場）の存在による位置エネルギーから成る．これは Z 個の同じ形の1粒子のハミルトニアンの和である．第2項 H_2 は，二つずつとった電子のあいだの相互作用ポテンシャルであり，$Z(Z-1)/2$ 個の同じ形の項から成る．これらの項はそれぞれ2電子から成る各組の相互作用を表わす．たとえば $w^{(ij)}$ は i 番目と j 番目の電子のあいだの相互作用ポテンシャルである．スピンに依存する力を無視すれば，$w^{(ij)}$ は単に静電的な斥力ポテンシャル

$$w^{(ij)} = e^2/r_{ij} \qquad (r_{ij} \equiv |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|) \tag{16}$$

---

(4) この方法の詳しい説明と実際的な応用については，D. R. Hartree, *The Calculation of Atomic Structures*, Wiley, 1957 を参照．また，Condon と Shortley, 前掲書（脚注 (3)）を参照．

である．しかし以下の取り扱いには，このような $w^{(ij)}$ の特殊な形は入ってこない．われわれは，$w^{(ij)}$ が i 番目と j 番目の電子の力学変数だけの関数であること，およびこの関数が置換 (ij) に関して対称であることを仮定するにすぎない．

$E[\Phi]$ は Φ のノルムに無関係であるから，試験関数として1に規格化されたものをとることはいつでもできる．第14章の記号をここでも使って，これを

$$|\Phi\rangle \equiv (Z!)^{1/2} A|\hat{\Phi}\rangle \tag{17}$$

の形に書く．ただし A は第14章の (26) で定義された反対称化演算子である．すなわち

$$A \equiv \frac{1}{Z!}\sum_P (-)^p P. \tag{18}$$

また，$|\hat{\Phi}\rangle$ は Z 個の1粒子ケットのテンソル積であり，1粒子ケットは任意であるが互いに直交し規格化されている．すなわち

$$|\hat{\Phi}\rangle \equiv |\alpha\rangle^{(1)}|\beta\rangle^{(2)}\cdots|\zeta\rangle^{(Z)} \equiv |\alpha^{(1)}\beta^{(2)}\cdots\zeta^{(Z)}\rangle \tag{19}$$

$$\langle\lambda|\mu\rangle \equiv \delta_{\lambda\mu} \qquad (\lambda, \mu = \alpha, \beta, \cdots, \zeta). \tag{20}$$

その結果，規格化の条件

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = 1 \tag{21}$$

は自動的に満たされている．

$E[\Phi]$ は H_1 と H_2 の平均値の和である．これらが置換によって不変な演算子であり，その結果 A と交換するということ，また A が射影子である $(A^2 = A)$ ということにより，$E[\Phi]$ の計算は簡単になる．

H_1 の平均値を順に計算すれば，

$$\begin{aligned}\langle H_1\rangle \equiv \langle\Phi|H_1|\Phi\rangle &= Z!\langle\hat{\Phi}|H_1 A|\hat{\Phi}\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{Z}\sum_P (-)^p\langle\hat{\Phi}|h^{(i)}P|\hat{\Phi}\rangle = \sum_{i=1}^{Z}\langle\hat{\Phi}|h^{(i)}|\hat{\Phi}\rangle\end{aligned}$$

と書かれる．$|\hat{\Phi}\rangle$ をその定義式 (19) に置き換えると，最後の式は

$$\langle H_1\rangle = \sum_\lambda \langle\lambda|h|\lambda\rangle \qquad (\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta) \tag{22}$$

という形に書き表わされる．それゆえ，これは各電子が占める Z 個の1粒子量子状態に関する1粒子ハミルトニアン h の平均値の和である．

同様に $\langle H_2\rangle$ は，2電子系のベクトルに対する演算子 w を表わす行列要素の和の形に書き表わされる．順に計算すれば，

$$\begin{aligned}\langle H_2\rangle \equiv \langle\Phi|H_2|\Phi\rangle &= Z!\langle\hat{\Phi}|H_2 A|\hat{\Phi}\rangle \\ &= \sum_{i<j}\sum_P (-)^p\langle\hat{\Phi}|w^{(ij)}P|\hat{\Phi}\rangle = \sum_{i<j}\langle\hat{\Phi}|w^{(ij)}(1 - P_{(ij)})|\hat{\Phi}\rangle,\end{aligned}$$

すなわち

$$\langle H_2\rangle = \sum{}' (\langle\lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle - \langle\lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle) \tag{23}$$

が成り立つ．この式のなかの $\sum'$ は，Z 個の1粒子状態 $\alpha, \beta, \cdots, \zeta$ の集まりから選ばれる $Z(Z-1)/2$ 通りの1粒子状態 λ, μ の組全部にわたって和をとることを示す．括弧のなかの第1項はケット $|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle$ に関する相互作用エネルギーの平均値であるが，$|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle$ は電子1が状態 λ に，電子2が状態 μ にあることを示す．第2項は交換の項すなわち状態 $|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle$ と $|\mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle$ にはさまれる w の行列要素である［この交換の項は実数で

$$\langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle = \langle \mu^{(1)}\lambda^{(2)}|w^{(12)}|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle$$

が成り立つことに注意する．この性質は $w^{(12)}$ がエルミートであり，また置換 (1 2) に対して不変であることから導かれる］．$\langle H_2\rangle$ はまた

$$\langle H_2\rangle = \frac{1}{2}\sum_{\lambda}\sum_{\mu}(\langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\lambda^{(1)}\mu^{(2)}\rangle - \langle \lambda^{(1)}\mu^{(2)}|w^{(12)}|\mu^{(1)}\lambda^{(2)}\rangle) \tag{24}$$

$$(\lambda, \mu = \alpha, \beta, \cdots, \zeta)$$

とも書かれる．

要約すれば

$$E[\Phi] = \langle H_1\rangle + \langle H_2\rangle \tag{25}$$

となり，$\langle H_1\rangle$ と $\langle H_2\rangle$ は (22) と (24) によって与えられる．

§9. フォック＝ディラックの方程式

つじつまの合う場の近似におけるシュレーディンガー方程式の変分解とは，Z 個の直交規格化ベクトル $|\lambda\rangle$ $(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta)$ に関して $E[\Phi]$ に停留値を与えるような解である．Z^2 個の条件 (20) にしたがう Z 個のベクトルの変化に関して E が停留値をとるということは，変分方程式

$$\delta E - \sum_{\lambda}\sum_{\mu}\varepsilon_{\lambda\mu}\delta\langle\mu|\lambda\rangle = 0 \tag{26}$$

を満たす Z^2 個の定数 $\varepsilon_{\lambda\mu}(\lambda, \mu = \alpha, \beta, \cdots, \zeta)$ が存在するということと同値である（ラグランジュの乗数法）．

Z^2 個の定数 $\varepsilon_{\lambda\mu}$ を一つの $Z\times Z$ 行列の要素とみなすことができる．この行列を ε で表わそう．これはエルミート行列である．実際，E は実数であるから δE も実数である．それゆえ，等式 (26) とその複素共役式との差を辺ごとにとれば，

$$\sum_{\lambda}\sum_{\mu}(\varepsilon_{\lambda\mu} - \varepsilon^*_{\mu\lambda})\delta\langle\mu|\lambda\rangle = 0$$

が得られ，したがって必ず

$$\varepsilon_{\lambda\mu} = \varepsilon^*_{\mu\lambda}$$

が成り立つ．Z 個のベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots, |\zeta\rangle$ は，1粒子状態の空間に含まれる一つの部分空間 $\mathcal{E}_\Phi$ の直交規格化基底をつくる．この部分空間において基底を変えることは，

$|\Phi\rangle$ に位相因数を掛けることになる．事実，この基底変換を定める $Z\times Z$ 型のユニタリ行列を S で表わし，新しい基底ベクトルを $|\alpha'\rangle, |\beta'\rangle, \cdots, |\zeta'\rangle$ で表わそう．すなわち

$$|\lambda'\rangle = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle S_{\lambda\lambda'}.$$

よく知られた行列式の積の性質により，これら Z 個の新しいベクトルからつくられるスレーター行列式は，Z 個の古いベクトルからつくられる行列式に $\det S$ を掛けたものに等しい．その結果

$$|\Phi'\rangle = (\det S)|\Phi\rangle.$$

また S はユニタリであるから，$|\det S| = 1$．したがって汎関数 $E[\Phi]$ は基底の変換に対して不変であり，変分方程式 (26) によって列 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots, |\zeta\rangle$ は基底の変換を除いて定められる．

また容易に示されるように，方程式 (26) は同じ形の方程式

$$\delta E - \sum_{\lambda}\sum_{\mu} \varepsilon'_{\lambda\mu}\delta\langle\mu'|\lambda'\rangle = 0$$

に変換される．ただし行列 ε' は変換 $S^{\dagger}$ によって ε を変換したものである．すなわち

$$\varepsilon'_{\lambda\mu} = (S^{\dagger}\varepsilon S)_{\lambda\mu}.$$

特に ε' が対角型となるように S を選ぶことができる．基底の選び方を制限することによって変分問題は変わらないから，今後は ε が対角型であるという条件をつける．そうすれば変分方程式 (26) は

$$\delta E - \sum_{\lambda} e_{\lambda}\delta\langle\lambda|\lambda\rangle = 0 \tag{26'}$$

と書かれる．変分 δE の計算は式 (22)，(24)，(25) を参照すれば容易に行なわれる．こうして (26′) の右辺は $2Z$ 個の変分 $\langle\delta\lambda|$ と $|\delta\lambda\rangle$ $(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta)$ の同次線形結合の形に書き表わされる．これら $2Z$ 個の変分は独立であるかのように考え（脚注 (²) を参照)，これらがどんな値をとっても上記の線形結合は 0 であるとし，H がエルミートであることを使えば，——計算の詳細は省くけれども——Z 個の直交ベクトル

$$|\alpha\rangle,\ |\beta\rangle,\ \cdots,\ |\zeta\rangle$$

に対する Z 個の方程式系

$$h^{(1)}|\lambda\rangle^{(1)} + \sum_{\mu} {}^{(2)}\langle\mu|w^{(12)}|\mu\rangle^{(2)}|\lambda\rangle^{(1)} - \sum_{\mu} {}^{(2)}\langle\mu|w^{(12)}|\lambda\rangle^{(2)}|\mu\rangle^{(1)} = e_{\lambda}|\lambda\rangle^{(1)}$$
$$(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta) \tag{I}$$

が得られる．左辺の第 2 項と第 3 項に係数 1/2 が現われないことに注意しよう．両辺に ${}^{(1)}\langle\lambda|$ を掛けて内積をとり，λ について加えると，

$$\sum_{\lambda} e_{\lambda} = \langle H_1\rangle + 2\langle H_2\rangle = E[\Phi] + \langle H_2\rangle \tag{27}$$

となる．この関係についてはあとで議論する．

実際の場合，1 粒子ケットはその波動関数

$$u_\lambda(q) \equiv \langle q | \lambda \rangle$$

によって表わされ，$q \equiv (\boldsymbol{r}, m_s)$ は空間の座標とスピンの全体を意味する．

ここで《電子密度》

$$\rho(q, q') \equiv \langle q | \rho | q' \rangle = \sum_\mu u_\mu(q) u_\mu^*(q') \tag{28}$$

を導入するとつごうがよい．これは上に定義した空間 $\mathcal{E}_\Phi$ への射影子

$$\rho = \sum_\mu | \mu \rangle \langle \mu |$$

を表わす行列である．対角要素

$$\rho(q) \equiv \rho(q, q) = \sum_\mu | u_\mu(q) |^2 \tag{29}$$

は点 q に一つの電子を見いだす確率密度である．

相互作用 $w^{(ij)}$ は変数 $q^{(i)}$，$q^{(j)}$ について対称な一つの実関数であるが，今後はこれを $w(q^{(i)}, q^{(j)})$ と書き表わす．これに対して

$$W_{\text{ech.}}(q, q') = \rho(q, q') w(q, q') \tag{30}$$

$$W(q) = \int \rho(q') w(q, q') \mathrm{d}q' \tag{31}$$

と置く．便宜上 $\int \mathrm{d}q'$ によって空間座標に関する積分とスピン座標に関する和を表わす．これらの記号を使えば，系（I）はつぎの積分微分方程式系の形に書き表わされる：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(q)\right] u_\lambda(q) + W(q) u_\lambda(q) - \int W_{\text{ech.}}(q, q') u_\lambda(q') \mathrm{d}q' = e_\lambda u_\lambda(q)$$

$$(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta). \tag{II}$$

これがフォック＝ディラックの積分微分方程式系である．

この方程式系は反復法によって解くことができる．密度の近似値 ρ_0 から出発し，これを (30) と (31) に代入すれば，W と $W_{\text{ech.}}$ に対する近似値を得る．これらを（II）に代入すれば，固有値方程式が得られ，その最初の Z 個の解 $u_\alpha^{(1)}, \cdots, u_\zeta^{(1)}$ から密度の新しい値 ρ_1 が導き出される．ρ_1 から出発していま述べた操作をあらためて繰り返せば新しい値 ρ_2 が導かれ，以下同様である．列 $\rho_0, \rho_1, \rho_2, \cdots$ は終局的には厳密解 ρ に収束する．この方法による収束についてここでは論じない．この収束の速さが ρ_0 の選び方によるのは当然である．

§10. 議　　論

方程式（II）の一つ一つは，この原子の Z 個の電子が占める Z 個の1粒子状態の一つを定めるシュレーディンガー方程式に似ている．しかし，演算子 W と $W_{\text{ech.}}$ が電子密度に依存し，その結果として固有解 $u_\alpha, u_\beta, \cdots, u_\zeta$ がハミルトニアンの決定に介入するから，これは本当の意味での固有値方程式になっていない．このことを別にすれば，この個

別的なハミルトニアンを吟味し，それに含まれるいろいろな項に物理的意味を与える試みは興味深い．

そのために，状態 λ を除いて電子の占める $(Z-1)$ 個の状態を考え，これらの状態にある電子の密度を $\rho^{(\lambda)}$ で表わす．すなわち

$$\rho^{(\lambda)} \equiv \sum_{\mu\neq\lambda} |\mu\rangle\langle\mu| \equiv \rho - |\lambda\rangle\langle\lambda|, \qquad \rho^{(\lambda)}(q,q') \equiv \rho(q,q') - u_\lambda(q)u_\lambda^*(q')$$

とし，定義式 (30) と (31) のなかの ρ を $\rho^{(\lambda)}$ に置き換えて得られる式をそれぞれ $W_{\text{ech.}}^{(\lambda)}$，$W^{(\lambda)}$ とする．また，状態 $|\lambda\rangle$ にある電子によって生じる平均ポテンシャル

$$X^{(\lambda)}(q) = \int |u_\lambda(q')|^2 w(q,q')\mathrm{d}q' \tag{32}$$

を導入する．$W^{(\lambda)}$ は他の $(Z-1)$ 個の状態にある電子から生じる平均ポテンシャルであり，一方 W はすべての電子によって生じる平均ポテンシャルである．すなわち

$$W(q) = W^{(\lambda)}(q) + X^{(\lambda)}(q).$$

このとき，系（II）の方程式のうち状態 λ に関するものはつぎの形に書き表わされる：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(q)\right]u_\lambda(q) + W^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q) - \int W_{\text{ech.}}^{(\lambda)}(q,q')u_\lambda(q')\mathrm{d}q' = e_\lambda u_\lambda(q)$$
$$(\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta). \tag{III}$$

実際，$W^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q)$ は $W(q)u_\lambda(q)$ と《自己エネルギー項》$X^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q)$ だけ違い，また明らかに，

$$\int W_{\text{ech.}}^{(\lambda)}(q,q')u_\lambda(q')\mathrm{d}q' = \int W_{\text{ech.}}(q,q')u_\lambda(q')\mathrm{d}q' - X^{(\lambda)}(q)u_\lambda(q)$$

である．

式 (III) を状態 λ にある電子の《シュレーディンガー方程式》として解釈するのは容易である．そのハミルトニアンは，この原子の核の場と電子 λ 以外の電子による平均の場のなかに置かれた電子 λ のエネルギーを表わす．これは4個の項から成っている．運動エネルギー $-\hbar^2\triangle/2m$，核の存在による位置エネルギー $V(q)$，他の $(Z-1)$ 個の電子の存在による平均位置エネルギー $W^{(\lambda)}(q)$，そして最後に，やはり他の電子の存在からくるものであるが，状態 λ と他の電子の占める $(Z-1)$ 個の状態とのあいだの交換効果を表わす第4項である．この交換効果は，積分核 $W_{\text{ech.}}^{(\lambda)}(q,q')$ によって定められる非局所ポテンシャルの存在として解釈されることがわかる．

この解釈は，固有値 e_λ が状態 λ にある電子のエネルギーを表わすことを暗示する．確かに，フォック＝ディラックの方程式によって与えられる Z 個の量 $e_\alpha, e_\beta, \cdots, e_\zeta$ はこの原子の Z 個の電子のイオン化エネルギーを良い近似で表わす．それにもかかわらず，これらの個別的なエネルギーの和が Z 電子系の全エネルギーを表わしえないということに

は十分注意しなければならない．個別的なエネルギーを加えるとき，それらの運動エネルギーは一度，核との相互作用エネルギーも一度数えられるが，電子と電子のあいだの相互作用エネルギーは二度数えられる．それゆえ全エネルギーを得るには，電子間の相互作用エネルギーの平均値，すなわち量 $\langle H_2 \rangle$ を差し引く必要がある．この結果はさきほどすでに示してある（式 (27)）．

§11. ハートリーの方程式

系（III）において交換の項を無視すれば，ずっと簡単な方程式系

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(q) + W^{(\lambda)}(q)\right]u_\lambda(q) = e_\lambda u_\lambda(q) \qquad (\lambda = \alpha, \beta, \cdots, \zeta) \tag{IV}$$

が得られる．この方程式を提案したハートリーは純粋に直観的な議論を用いたが，変分法を使ってこれを導くこともできる．それには（17）によって定められる反対称積 $|\Phi\rangle$ の代りに，（19）によって定められるケット $|\hat{\Phi}\rangle$ のような1粒子ケットの単純な積を試験関数としてとればよい [5]．

ハートリーの方程式系もフォック＝ディラックのそれと同じように，反復法によって解くことができる．交換の項がないため，計算はずっと短くなる．しかしこの系は，フォック＝ディラックの系よりも対称的でない．すなわち，ハートリーのハミルトニアン $h + W^{(\lambda)}$ はすべての1粒子状態に対して同じではなく，したがって Z 個のハートリーの方程式の固有解は互いに直交しない．その結果この方法を適用するときにいくつかの困難が生じるのであるが，ここではそれについて論じない．

III. 分子の構造

§12. 一般論．電子の運動と核の運動の分離

分子はいくつかの原子の集まりからつくられた束縛状態である．それゆえ分子はある個数の原子核とそれらをとりまく電子から成る．

このように複雑な系の定常状態を調べるのは，きわめてむずかしい問題である．それにもかかわらず，分子はつぎのような特徴をもっているので問題が単純化される．すなわち，電子と核を支配する力は同じ程度の強さであるのに，電子の質量は核の質量にくらべてはるかに小さい．その結果，電子の運動は核の運動よりはるかに速い．このことから，

---

(5) このことによってハートリーの方程式の正しさが立証されたとは考えられないであろう．ケット $|\hat{\Phi}\rangle$ はケット $|\Phi\rangle$ とは違って，この系のケットベクトルの空間に属さないからである．

きわめて良い近似で，これらの二つの運動を分離して取り扱うことができる．実際，第1近似においては，これらの電子が核を動かない力の中心のように《見る》から，電子の力学的状態は，いくつかの核が固定されている場合の電子系の状態である．そして核の移動は緩やかであるから，電子を支配するこのポテンシャルの変化を，電子の力学的状態は断熱的に追ってゆく（第17章，第II節を参照）．他方，核の移動が目につく程度に行なわれるあいだに電子は何周期も運動するから，核の受ける効果は事実上平均的なものにすぎない．それゆえ核の運動を定めるに当たって，電子との相互作用を考える代りに，電子が何回も回ったときの相互作用の平均をとっても大きな誤差は生じない．その結果として得られるシュレーディンガー方程式においては，電子の変数がまったく姿を消してしまう．この変数分離法の基礎になっている近似は**断熱近似**と呼ばれる．

この節の目的は，上記の方法に関する図式的な説明を与え，これが成り立つための条件を論じることである．この説明を始める前に，核の運動の半古典的な解析と，いろいろな効果の大まかな評価を行ない，それによって上に述べたことをもっと精しくし，補充しておこう．

核のシュレーディンガー方程式に現われるポテンシャルは，核のあいだの相互距離だけで決まる．分子が存在する以上，このポテンシャルは，核間の距離がある有限の決まった値をとるとき最小値をとるにちがいない．この最小値は系の安定な平衡点に対応し，この点のまわりで核は小さな振動を行なうことができる．このような核の内部振動に，系全体の並進および回転の運動が重ね合わされるが，重心〔系〕の導入により，並進運動は他のものから完全にまた厳密に分離される．われわれは重心が系の全質量に等しい質量をもつ自由粒子のように移動することを知っている．以下の議論においては，重心の分離がすでにすませてあるものとし，回転運動と核の振動だけを考える．

電子の質量を m で表わし，核の質量の大きさ程度の質量を M とし，分子内の核の平均相互距離を a とすれば，おおよそ

$$a \simeq 10^{-8}\,\mathrm{cm}, \qquad m/M \simeq 10^{-3} - 10^{-5} \tag{33}$$

が成り立つ[6]．

分子の1次元的な大きさは a の程度であるから，この量によって電子運動の振幅の大きさの程度が与えられる．不確定性関係によれば，電子の運動量は $\hbar/a$ の程度である．つまり運動エネルギーは約 $\hbar^2/ma^2$ である．この $\hbar^2/ma^2$ によって電子の基底状態における結合エネルギーの大きさの程度や，電子準位の分離の大きさの程度が与えられる．すなわ

---

(6)　この質量比は水素分子のときが最も大きい．この場合には

$$(m/M)_{\mathrm{H}_2} \simeq 0.5 \times 10^{-3}$$

である．

ち

$$\varepsilon_{\mathrm{el.}} \simeq \hbar^2/ma^2 \tag{34}$$

(この評価を第11章 §3の評価とくらべよう).

核の運動に関しては，まず回転運動を調べる．この系の慣性モーメントは Ma^2 の程度である．角運動量の二乗は $\hbar^2$ 程度の単位によって変わるから，回転のエネルギーは

$$\varepsilon_{\mathrm{rot.}} \simeq \hbar^2/Ma^2 \tag{35}$$

程度の単位によって変わる．

振動については，第1近似として，これを量子 $\varepsilon_{\mathrm{vib.}}=\hbar\omega$ の調和振動のようにみなすことができる．便宜上，位置エネルギーの零点を核の安定な平衡状態のところに定める．もしも核のうちの一つを距離 a だけ遠ざけるならば，そのような系は $M\omega^2a^2/2$ の位置エネルギーを得る．ところが，この変形は分子を構成する原子のうちの一つを他の原子から完全に引き離すことに相当する．つまりエネルギーの増加は $\varepsilon_{\mathrm{el.}}$ 程度である．言いかえれば，

$$M\omega^2 a^2 \simeq \hbar^2/ma^2,$$

したがって

$$\varepsilon_{\mathrm{vib.}} \simeq \hbar^2/(mM)^{1/2}a^2. \tag{36}$$

(34), (35), (36) をくらべて，

$$\varepsilon_{\mathrm{rot.}} \ll \varepsilon_{\mathrm{vib.}} \ll \varepsilon_{\mathrm{el.}}$$

であることがわかる．もっと精密な形では，ボルンとオッペンハイマー (7) にしたがってパラメータ

$$\kappa=(m/M)^{1/4} \tag{37}$$

を導入するとき，

$$\varepsilon_{\mathrm{rot.}} \simeq \kappa^2\varepsilon_{\mathrm{vib.}} \simeq \kappa^4\varepsilon_{\mathrm{el.}} \tag{38}$$

となる．準位の間隔 ε に古典振動数 $\varepsilon/\hbar$ が対応することは知られている．したがって，電子の運動は核の振動の運動より速く，後者は全体の回転運動より速いという結論が得られ，この §12の初めに示したことと一致する．これらの異なる振動数の比は κ^2 の程度，つまり約 1/100 である．すなわち，分子の全体が完全に1回転するあいだに，核は平衡の位置のまわりで約100回の振動を行ない，電子は約10,000回の回転を行なう．

§13. 固定された核に対する電子の運動

前の§12の半古典的な議論を念頭において，分子の定常状態を求める問題に入る．図式

---

(7) M. Born と J. R. Oppenheimer, *Ann. der Phys.*, **84** (1927), 457. ボルンとオッペンハイマーのオリジナルな理論については，§16を見よ．

的な説明を問題にしているのであるから，大胆にデータを単純化しよう．もちろんこのような単純化は，方法の原理そのものに影響を与えない範囲に限る．特に，電子と核はスピンをもたない粒子として取り扱う．

電子と核の自由度に目じるしをつけるにはそれぞれ添字 i と j を用いることにし，電子の座標を x_i，核の座標を X_j，座標 X_j をもつ核の質量を M_j で表わす．また電子の運動エネルギーを T_e，核のそれを T_N，分子を構成するいろいろな粒子のあいだの相互作用ポテンシャルを V で表わす．分子のハミルトニアン H はこれら三つの項の和である．すなわち

$$H = T_N + T_e + V. \tag{39}$$

ここで

$$T_N = -\sum_j \frac{\hbar^2}{2M_j}\frac{\partial^2}{\partial X_j^2}, \qquad T_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \tag{39'}$$

$V \equiv V(x, X)$ は電子と核の座標によって定まる一つの関数であり，系の粒子から二つずつをとってつくったクーロン・エネルギーの和である．

いっそう簡単なハミルトニアン

$$H^{(0)} = T_e + V \tag{40}$$

を考える．H の式において核の運動エネルギーを無視すればこの式が得られる．$H^{(0)}$ は $M_j \to \infty$ となる極限における系のハミルトニアンであり，その定常状態は固定された核に対する電子系の定常状態である．実際，$H^{(0)}$ は X_j に関する導関数を含まないから，

$$[X_j, H^{(0)}] = 0$$

が成り立ち，$H^{(0)}$ と X_j とは同時に対角化される．言いかえると，$H^{(0)}$ の固有値問題を解くには，核の位置座標として一定の値 X'_j を決めてしまい，このような X_j の確定値に対応するベクトルのなかから $H^{(0)}$ の固有ベクトルを求めることができる．X'_j の組を X' で表わそう．組 X' を与えるごとに，$H^{(0)}$ の固有値列 $W_n(X')$ が一つ対応する．量子数 n によって，この列に属する要素は互いに区別される．与えられた n と X' に対して，一つまたは場合によっていくつかの線形独立な固有ベクトルが得られる．あとの場合，これらは補助の添字によって互いに区別されるが，われわれはそれを s で表わそう．要約すれば，$H^{(0)}$ のシュレーディンガー方程式は

$$H^{(0)}|n s X'\rangle = W_n(X')|n s X'\rangle \tag{41}$$

という形に書き表わされる．

表現 $\{x X\}$ において，固有ベクトル $|n s X'\rangle$ は波動関数

$$\varphi_{ns}(x, X')\,\delta(X - X') \tag{42}$$

によって表わされ，関数 φ はシュレーディンガー方程式

$$[T_e + V(x, X')]\varphi_{ns}(x, X') = W_n(X')\varphi_{ns}(x, X') \tag{43}$$

の解である．

方程式 (43) において，X' は単なるパラメータの役割を果たすにすぎない．これは核の位置を X' に固定したときに得られる分子内電子のシュレーディンガー方程式である．この方程式の各固有解には，$H^{(0)}$ の固有関数が (42) の形で一つ対応する．X' のとりうるすべての値に対して方程式 (43) の固有解が全部わかれば，このようにして $H^{(0)}$ の固有関数の完全系がつくられる．あとで規格化の問題が重要になることから，いつでも直交規格化固有関数をとることにしておく．$\varphi_{ns}(x, X')$ を x だけの関数とみなすとき，これが1に等しいノルムをもつならば上の条件は満たされる．

固有値問題 (43) は1原子の定常状態を求めることに似ており，類似の方法，たとえばつじつまの合う場の方法によって解くことができる．しかし今の場合には，電子がいくつかの力の中心によって支配され，原子の問題に見られた対称性は，それによって大きく——全面的にというわけではないが——崩れている．

この対称性の問題について簡単に論じておく[8]．ポテンシャル $V(x, X)$ は，電子と核から成る全体の並進，回転，反転〔および鏡映〕によって不変である．さらにそれは系の同種粒子の置換によっても，時間の反転によっても不変である．いま，核の位置は X' に固定されているとしよう．$V(x, X')$ を x だけの関数とみなせば，上に述べた変換のうち核の配置を不変にするものに関しては対称性をもつ．たとえば，HCl のような2原子分子においては，塩素と水素の核を結ぶ軸のまわりの回転と，この軸を通る平面に関する鏡映によって $V(x, X')$ は不変である．時間の反転による不変性と合わせて，これだけが対称性として保たれる．十分に複雑な分子においては，時間の反転による不変性しか残らない．$H^{(0)}$ を変数 x だけの関数とみなすとき，その対称性は明らかに $V(x, X')$ の対称性と同じである．準位 $W_n(X')$ の縮退はこれらの対称性に結びつけられる (第15章を参照)．

縮退による複雑化をすっかり除くために，今後は $V(x, X')$ が時間の反転による不変性以外に対称性をもたないと仮定する．これによって，$W_n(X')$ は偶然の場合を除けば縮退しないことが保証される．実際，われわれが (遊離基ではなく) 分子を問題にするとき，電子の個数は偶数であって，第15章 §21 で取り扱った第一の場合が生じるからである．このとき固有関数 $\varphi_n(x, X')$ が実数になるように，その位相を固定することができる．それゆえわれわれは，$W_n(X')$ に縮退がなく，$\varphi_n(x, X')$ は実数であると仮定する．

---

[8] 電子と分子の波動関数がもつ対称性に関する総括的な解説については，L. D. LANDAU と E. M. LIFSHITZ, *Quantum Mechanics* (英訳), Pergamon Press, London, 1958 (邦訳；ランダウ，リフシッツ《量子力学》佐々木・好村・井上訳，東京図書) を参照．

この §13 を終えるに当たって二つの注意を述べる．

変数 x だけに作用する演算子とみなせば，$H^{(0)}$ はパラメータ X' の連続関数である．その固有値と固有関数についても，後者の位相を固定しておく限り，同じことが成り立つ．言いかえれば，n を固定するとき，$W_n(X')$ と $\varphi_n(x, X')$ は X' の連続関数である．

すべての変数に作用する演算子とみなせば ((41) を参照)，$H^{(0)}$ は $V(x, X)$ についてさきにあげたいろいろな変換に関して不変である．それゆえ，これらの変換のうちの任意の一つによって $|nX'\rangle$ から導き出されるベクトルは，いずれも $H^{(0)}$ の固有ベクトルであり，同じ固有値 $W_n(X')$ に対応する．言いかえると，これらの変換のうちの任意の一つを X' に施すとき，$W_n(X')$ は不変である．特に，$W_n(X')$ は核の相互距離，すなわち核によってつくられる幾何学的図形だけで決まり，この図形を移動させたり（並進と回転），対称図形に置き換えたり（反転と鏡映）しても変わらない．

§14. 断 熱 近 似

前の §13 では，核が固定されている場合における電子の定常状態を考えた．今度は核がある法則 $X'(t)$ にしたがって緩やかに変位するとしよう．この変位が十分に遅いとき，電子の力学的状態は，これらを支配するポテンシャルの変化を断熱的に追ってゆく．つまり，時刻 t_0 における電子の力学的状態が準位 $W_n(X'(t_0))$ に対応する状態 $(n, X'(t_0))$ ——すなわち波動関数 $\varphi_n(x, X'(t_0))$ で表わされる状態——であるならば，時刻 t における状態は，n を一定に保ちながら連続的に前の状態から導かれる状態 $(n, X'(t))$ であると考えられる．

この断熱近似が成り立つための条件は第 17 章 §13 で論じられた（第 17 章の判定条件 (114) を参照）．電子が (n, X') と異なる状態に見いだされる確率 η_n は

$$\eta_n \simeq \left|\frac{\alpha_n}{\omega_n}\right|^2 \tag{44}$$

で与えられる．ただし α_n はベクトル $\varphi_n(x, X')$ の《角速度》であり，ω_n は準位 $W_n(X')$ に結びついた最小のボーア振動数である．

これを評価するために，§12 の半古典的な解析を参照する．電子準位の間隔は関係式 (34) から得られ，

$$\omega_n \simeq \varepsilon_{\mathrm{el.}}/\hbar \simeq \hbar/ma^2 \tag{45}$$

が成り立つ．α_n を評価するために，まず $\partial\varphi_n/\partial X'_j$ のノルムの大きさの程度を求めよう．仮定により φ_n はノルム 1 の実関数である．この分子の 1 原子が他の原子から実際上分離されるためには，核を平衡の位置から a 程度の距離に対応するだけ動かさなければならないことはわかっている．言いかえれば，関数 $\varphi_n(x, X')$ をこれに直交する関数に変換する

ために，$\Delta X'_j \simeq a$ 程度の変化を必要とする．したがって $\partial\varphi_n/\partial X'_j$ は，上記の関数を a で割った商におおよそ等しく，そのノルムは $1/a^2$ の程度である．すなわち

$$\int\left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X'_j}\right)^2 \mathrm{d}x \simeq \frac{1}{a^2}. \tag{46}$$

ところで α_n^2 は定義により（実）関数 $\mathrm{d}\varphi_n/\mathrm{d}t$ のノルムに等しい．それゆえ，座標 X'_j の速度を $v_j = \mathrm{d}X'_j/\mathrm{d}t$ とすれば，α_n^2 は関数 $\sum_j v_j(\partial\varphi_n/\partial X'_j)$ のノルムであるから，おおよそのところ

$$\alpha_n^2 \simeq \frac{1}{a^2}\sum_j v_j^2$$

が得られる．核の運動エネルギーを t_{N} で表わせば，上の評価はまた

$$\alpha_n^2 \simeq \frac{t_{\mathrm{N}}}{Ma^2} \tag{47}$$

と書かれる．(44) において，評価 (45) と (47) を考慮すれば，

$$\eta_n \simeq \kappa^4 \frac{t_{\mathrm{N}}}{\varepsilon_{\mathrm{el.}}} \tag{48}$$

が得られる．

この現象に対する上記の半古典的解析は，分子の定常状態を求めるときの手引きとして役立つ．そこでハミルトニアン H の固有値問題を考えよう．定義 (39) と (40) により，

$$H = H^{(0)} + T_{\mathrm{N}} \tag{49}$$

が成り立つ．核の運動エネルギーの項 T_{N} をまったく無視することができるとすれば，分子のハミルトニアンは $H^{(0)}$ になり，各定常状態 $|nX'\rangle$ は電子量子数 n のはっきり決まった値と，核のはっきり決まった位置 X' に対応する．また核は X' に固定されたままであり，電子の運動は関数 $\varphi_n(x, X')$ によって表わされよう．T_{N} の効果は，$H^{(0)}$ の固有ベクトルのうち，近くにある X' に対応するものを結びつけることである．

断熱近似においては，電子量子数を異にするベクトルのあいだの結びつきを無視し，n が良い量子数であること，すなわち

$$n \simeq \text{定数} \tag{50}$$

であると仮定する．この仮定のもとに，H の固有ベクトルは，一つのはっきり決まった n の値に対応するベクトル $|nX'\rangle$ の線形結合であるから，$\psi(X')$ を X' の任意の関数とするとき，

$$\int |nX'\rangle\psi(X')\mathrm{d}X' \tag{51}$$

の形のベクトルである．表現 $\{xX\}$ において，この型のベクトルは

$$\Phi_n(x, X) \equiv \varphi_n(x, X)\psi(X) \tag{52}$$

という形の波動関数によって表わされる．

この近似において H の固有解を決めるには，試験関数として $\Phi_n(x, X)$ をとり，変分法を適用すればよい．この場合われわれは，試験関数の変域として状態空間のある部分空間，すなわち (51) の形のベクトルがつくる空間 $\mathcal{E}_n$ をとることになる．すでに知ったように (§3)，このようなときは変分法によって上の部分空間における固有値方程式が導き出される (式 (9))．今の場合に得られるのは，未知関数 $\phi(X)$ に対するシュレーディンガー方程式である．この方程式のハミルトニアンを H_n で表わせば，H_n は H の $\mathcal{E}_n$ 上への射影であり，核の力学変数だけに作用する演算子である．H_n の固有値は電子量子数 n に対する分子のエネルギー準位である．

生じる誤差は，この §14 の初めの議論に基づいて評価することができる．この方法によって得られた近似解の一つを Φ_n で表わし，対応する厳密解を Ψ_n としよう．これら二つの解は 1 に規格化されているとする．差

$$\delta\Psi \equiv \Psi_n - \Phi_n$$

は厳密解と断熱近似解のへだたりを表わす．これはもともと部分空間 $\mathcal{E}_n$ の外にあり，そのノルムはさきに定義した量 η_n に等しい．このことから，評価 (48) を使って，

$$\iint |\delta\Psi|^2 \mathrm{d}x\,\mathrm{d}X \simeq \kappa^4 \left\langle \frac{T_{\mathrm{N}}}{\varepsilon_{\mathrm{el.}}} \right\rangle \simeq \kappa^4 \frac{\varepsilon_{\mathrm{vib.}}}{\varepsilon_{\mathrm{el.}}} \simeq \kappa^6.$$

言いかえれば，おおよそ

$$\delta\Psi \simeq \kappa^3 \Phi' \tag{53}$$

が成り立ち，Φ' は空間 $\mathcal{E}_n$ に直交し，1 に等しいノルムをもつ一つの関数である．汎関数

$$E[\Psi] \equiv \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

は解 Ψ_n において停留値をとるから，関数 Φ_n によるエネルギーの計算は，変分 $\delta\Psi$ に対して 2 次の誤差をもたらす．すなわち

$$\delta E \simeq \langle\delta\Psi|H|\delta\Psi\rangle = \kappa^6 \langle\Phi'|H|\Phi'\rangle \simeq \kappa^6 \varepsilon_{\mathrm{el.}}.$$

(38) とくらべて，

$$\delta E/\varepsilon_{\mathrm{rot.}} \simeq \kappa^2 \ (\simeq 10^{-2} \ll 1) \tag{54}$$

に注意する．

要約すると，断熱近似によって分子の波動関数を決めるときには κ^3 程度の誤差が生じ (式 (53))，エネルギーを評価するときには回転の準位の間隔より κ^2 倍小さな誤差が生じる (式 (54))．

§15. 断熱近似による核のハミルトニアン

変分法を適用して，今度は関数 $\psi(X)$ の《シュレーディンガー方程式》を決定しよう．$\varphi_n(x,X)$ は方程式 (43) の実の解であり，そのノルムを x についての積分によって定めると1に等しいことを思い出そう．すなわち，

$$\varphi_n^*(x,X)=\varphi_n(x,X) \tag{55}$$

$$\int\varphi_n^2(x,X)\mathrm{d}x=1. \tag{56}$$

これにより，X について連続な関数 φ_n は符号を除いて定まるが，符号は任意に固定しておく．(56) の両辺を微分することによってつぎの等式が得られる．これらはあとで役に立つ．

$$\int\varphi_n\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\mathrm{d}x=0 \tag{56'}$$

$$\int\varphi_n\frac{\partial^2\varphi_n}{\partial X_j^2}\mathrm{d}x=-\int\left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\right)^2\mathrm{d}x. \tag{56''}$$

さて，関数 $\psi(X)$ は座標 X の二乗積分可能な関数のうちの任意の一つである．

試験関数の変域をこのようにはっきりさせてから，汎関数 $E[\Phi_n]$ を $\psi(X)$ の汎関数の形で表わしてみよう．φ_n の性質から，容易に

$$\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle\equiv\iint|\Phi_n|^2\mathrm{d}x\,\mathrm{d}X=\int|\psi|^2\mathrm{d}X \tag{57}$$

が導かれる．また一方では，

$$\langle\Phi_n|H|\Phi_n\rangle\equiv\iint\Phi_n^*(H\Phi_n)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}X=\int\psi^*(H_n\psi)\mathrm{d}X \tag{58}$$

と書くことができる．ただし $H_n\psi$ は，

$$H_n\psi\equiv\int\varphi_n(x,X)[H\varphi_n(x,X)\psi(X)]\mathrm{d}x \tag{59}$$

としておく．その結果，

$$E[\Phi_n]=\frac{\int\psi^*(H_n\psi)\mathrm{d}X}{\int|\psi|^2\mathrm{d}X}. \tag{60}$$

等式 (59) は関数 $\psi(X)$ の空間における一つの演算子 H_n を定義する関係式である．明らかにこれは線形演算子であるが，エルミートであることも示される（このことはあとで証明しよう）．断熱近似においては，分子のシュレーディンガー方程式の固有解は，$\psi(X)$ の変分に関して $E[\Phi_n]$ に停留値を与える解である．関係 (60) によれば，これらは固有値方程式

$$H_n\psi=E\psi \tag{61}$$

の解である．これが求める《シュレーディンガー方程式》である．

電子量子数 n に対応する分子エネルギーの準位は H_n の固有値である．これに対応する波動関数は，式 (52) の $\phi(X)$ のところにシュレーディンガー方程式 (61) の対応する解を代入して得られる関数 Φ_n である．

関数 φ_n の性質を利用すれば，定義式 (59) に現われる積分は大部分実行され，H_n に対してもっと使いやすい表現が得られる．

性質 (43) から，

$$H^{(0)}\varphi_n(x, X)\phi(X) = W_n(X)\varphi_n(x, X)\phi(X)$$

が導かれ，これから関係 (56) を使って，

$$\int \varphi_n[H^{(0)}\varphi_n\phi]\mathrm{d}x = W_n(X)\phi(X). \tag{62}$$

核の運動エネルギーを表わす式 (39′) から，

$$T_{\mathrm{N}}\varphi_n\phi = \sum_j\left(-\frac{\hbar^2}{2M_j}\right)\left[\varphi_n\frac{\partial^2\phi}{\partial X_j^2} + 2\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\frac{\partial\phi}{\partial X_j} + \frac{\partial^2\varphi_n}{\partial X_j^2}\phi\right]$$

が導かれる．この両辺に $\varphi_n(x, X)$ を掛け，x について積分すれば，

$$\int \varphi_n(T_{\mathrm{N}}\varphi_n\phi)\mathrm{d}x$$

を表わす式を導き出すことができる．右辺の括弧のなかの３項の寄与を分離するとつごうがよい．第１項の寄与は性質 (56) からただちに出る．結果は単に $(T_{\mathrm{N}}\phi)$ となり，演算子 T_{N} は X の関数に作用する微分演算子という通常の意味を保つ．すなわち

$$T_{\mathrm{N}}\phi \equiv \sum_j\left(\frac{-\hbar^2}{2M_j}\right)\frac{\partial^2\phi}{\partial X_j^2}. \tag{63}$$

第２項の寄与は性質 (56′) により０となる．第３項の寄与は ϕ に一つの関数 $W'_n(X)$ を掛けた積であり，性質 (56″) を使えば，この関数を

$$W'_n(X) = \sum_j\frac{\hbar^2}{2M_j}\int\left(\frac{\partial\varphi_n}{\partial X_j}\right)^2\mathrm{d}x \tag{64}$$

という形に書くことができる．以上をまとめると，

$$\int \varphi_n(T_{\mathrm{N}}\varphi_n\phi)\mathrm{d}x = (T_{\mathrm{N}} + W'_n)\phi \tag{65}$$

が得られる．

定義 (59) と式 (49)，(62)，(65) から，

$$H_n = T_{\mathrm{N}} + W'_n + W_n \tag{66}$$

が導かれる．

公式 (66) の３項を解釈するのはやさしい．

位置エネルギー $W_n(X)$ は $H^{(0)}$ の平均である. すなわち核の位置 X を決めるとき, これに対する核のあいだの相互作用エネルギーと, 量子状態 n にある電子のエネルギーの平均値との和である. §12 の議論により, $W_n(X)$ はある点 X_0 において狭義の最小値をとり, X_0 は核によってつくられる図形の安定な平衡点である.

他の二つの項は核の運動エネルギーを電子の力学的状態について平均した値から出てくる. これは本来の運動エネルギーの項 T_N のほか, 位置エネルギーの項 $W'_n(X)$ を与える (9). さらにこの項は位置エネルギー W_n に対する小さな修正になっている. 実際, (46) によって与えられる評価を (64) に代入すれば,

$$W'_n(X_0) \simeq \frac{\hbar^2}{Ma^2}$$

が得られる. それゆえ W'_n は回転の量子程度の大きさをもつ正の量である.

§16. ボルン=オッペンハイマーの方法

ボルンとオッペンハイマーによって創案された分子の取り扱い方 (10) は, 今まで述べた変分法といくらか違うものである. その方法は, ハミルトニアン H を κ のべき級数に展開し, H の固有値問題を摂動法による普通の道筋にしたがって解くのである.

前の §15 では, $W_n(X)$ が最小になる点を X_0 で表わした. 実は, この平衡点は回転を除いて定められるにすぎない. 核全体を回転するとき W_n が不変であるからである (ついでながら, W'_n は一般に不変でないことに注意する). より詳しく言うため, $X=(\omega, \xi)$ と置き, 核全体の向きを指定する 3 個の角変数 (2 原子分子に対しては 2 個の角変数) を ω で表わし, それぞれの核の他の核に関する相対的な位置を指定する動径変数の全体を ξ で表わす. このとき W_n は ξ だけによって決まり, 平衡の位置は動径変数のある値 ξ_0 に対応する.

ボルンとオッペンハイマーにならって,

$$\xi = \xi_0 + \kappa u$$

によって定められる新しい動径変数 u を導入する. u は, 核の配置が平衡の配置からどれだけずれているかを, つごうのよい単位を使って表わすものである. κ はおおよそ核の振幅と電子の運動の幅との比に等しいから, u の変域のひろがりは x の変域のひろがりと同じ程度, すなわち a 程度の大きさをもつ.

この変数変換を行なったのちに, H のなかに現われる位置エネルギーを u のべき級数に展開すれば, κ のべきによる H の級数展開が得られる. T_N の項は κ^2 と同位である. 回転の準位を正確に得るためには, κ^4 の項まで展開を進めなければならない. 展開を κ^5 の項で打ち切ると, それより高位の無限小を除いて, 断熱近似の場合と同じ結果が得られ

---

(9) この項が現われるのは, 古典系において一様に回転する座標系を採用するとき, 運動方程式のなかに遠心力の項が現われるのに似ている.

(10) 前掲論文, 脚注 (7).

る．κ^6 またはそれ以上の項まで進めると違いが現われるが，このことは大きさの程度に関する §12 の解析と一致する．

§17.　2原子分子に関するおおよその概念

断熱近似による分子の一般的な研究にはこれ以上立ち入らない．特に，振動と回転の分離についてはここで論じないが，この分離をうまく行なうには，変分法を適用するときの形式にいくらか修正を加えた方がよいであろう．その修正は，2種類の変数の代りに3種類の変数，すなわち系全体の方向を指定する角変数，一つ一つの核の他の核に対する相対的な位置を指定する変数，核に対する電子の位置を指定する変数を導入して行なわれる．終りに当たって，われわれは2原子分子の構造に関して参考になることをいくつか述べるにとどめる．

重心の分離を済ませると，核の力学変数は一つの核の他の核に対する相対運動に対応する．それゆえこの場合の座標 X の集合は，第1の核の第2の核に対する位置を表わすベクトル $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_1 - \boldsymbol{R}_2$ の成分になってしまう．電子の座標の集合はつねに x で表わす．詳しく言えば，核の重心に対する電子の相対座標である．話を簡単にするため，スピンの存在を無視し (11)，電子の（軌道）角運動量を $\boldsymbol{L}$ で表わし，核のそれを $\boldsymbol{G}$ とし ($\boldsymbol{G} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$)，全角運動量を $\boldsymbol{K}$ とする．すなわち

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{G} + \boldsymbol{L}. \tag{67}$$

最後に，分子の軸の方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{u}$ で表わし ($\boldsymbol{u} = \boldsymbol{R}/R$)，この軸の方向に対する各ベクトルの成分には添字 u を付ける．ついでながら，演算子間の等式

$$(\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{R}) = 0 \tag{68}$$

に注意する．その結果 $G_u (\equiv (\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{u}))$ は恒等的に0となり，したがって

$$K_u = L_u.$$

これだけ決めた上で，残りのものについては前の §12—15 の記号をそのまま用いる．

まず電子の運動を調べる．$H^{(0)}$ を電子の変数だけに作用する演算子とみなすとき，その対称性はシュタルク効果の場合と同じである．すなわち，$H^{(0)}$ は軸 $\boldsymbol{u}$ のまわりの回転と，$\boldsymbol{u}$ を含む平面に関する鏡映によって不変である．二つの核が同種であるときには，$H^{(0)}$ はさらに反転 ($x \to -x$) によっても不変であるが，この特殊な場合はしばらく考えないことにする．

---

(11) 回転の量子にくらべてスピン－軌道相互作用が小さいときには，スピンの存在が結果にいちじるしい変更をもたらすということはなく，それはただ微細構造の出現によって知られるにすぎない．この間の事情は，原子における LS 結合の場合と同様である．逆の場合には，スペクトルの一般的な挙動がかなり深刻な修正を受ける．L. D. Landau と E. M. Lifschitz, 前掲書（脚注 (8)）を参照．

いろいろな状態を分類するには，シュタルク効果に関する第15章 §14 の議論を思い出せばよい． $H^{(0)}$ の各準位は L_u^2 の固有値を与えることによって定まる． L_u^2 の固有値は $\hbar^2 \Lambda^2$ という形に書き表わされ，Λ は負でない整数値をすべて取りうる量子数である．スペクトル分析の伝統にしたがえば，最初の三つの値 $\Lambda = 0, 1, 2$ に対応する項はそれぞれギリシアの大文字 Σ, Π, Δ によって表わされる．$\Lambda \neq 0$ のとき，準位は2位の縮退を示す．これには，分子の軸方向の角運動量成分の値 $\hbar\Lambda$ および $-\hbar\Lambda$ にそれぞれ対応する二つの固有ベクトルを対応させることができる．これに反して，準位 $\Sigma(\Lambda = 0)$ は単純である．Σ の固有ベクトルは，軸を通る平面に関する鏡映によって不変であるか，または符号を変える．このことにより，Σ は Σ^+ と Σ^- の2種に分類される．2原子分子の大多数において，基底状態は Σ^+ 状態である．

ここで全ハミルトニアンを考え，断熱近似を適用するための条件を調べる．電子の準位にたまたま生じた縮退によって事態が複雑になるのは，単に見掛け上のことである．実際，T_{N} によって $\hbar\Lambda$ 状態と $-\hbar\Lambda$ 状態のあいだにもたらされる相互作用 (*) は，回転の準位の間隔より小さいことが示されるから，これは無視されてしまう．言いかえれば，近似式 $L_u =$ 定数 によって近似式 (50) を補うことになる．

他方 §14 と §15 で採用した変分法の適用形式は，一般的な種類の議論にはうまく適合するとしても，これによって回転と振動のあいだの分離を明らかにするのは容易でない．困難の原因は，補正 $W'_n(\boldsymbol{R})$ が回転によって一般に不変でないという事実である．むしろ初めから回転による H と $H^{(0)}$ の不変性を考慮し，与えられた全角運動量をもつ H の固有ベクトルを求める方がよい． $H^{(0)}$ の固有ベクトルはつぎの i)—iii) によって特徴づけられる：

i) 全角運動量の量子数 K および m_K (m_K は空間に固定された一つの軸の方向にとった $\boldsymbol{K}$ の成分であり，これを K_u と混同してはならない)，

ii) 電子の状態を指定する量子数，すなわち n のほか，$\Lambda \neq 0$ のときには場合により $s(\equiv L_u$ の符号$)$，

iii) 核間の距離 R.

このときシュレーディンガー方程式 (41) は

$$H^{(0)}|K m_K n s R\rangle = W_n(R)|K m_K n s R\rangle \tag{69}$$

と書かれる．断熱近似によって H の固有ベクトルを求める範囲は，はっきり決まった K, m_K, n, s の値に対応するベクトルがつくる部分空間，すなわち

(*) ［訳注］ $\hbar\Lambda$ 状態と $-\hbar\Lambda$ 状態とのあいだの T_{N} の行列要素（非対角要素）のこと．これにより，この二つの状態がすこしずつ混じり合うわけであるが，それを無視しようというわけである．

$$\int_0^\infty |K m_K n s R\rangle y(R)\mathrm{d}R \tag{70}$$

という形のベクトルの集まりである（式 (51) と比較せよ）．こうしておいて，§14 や §15 の場合と同じように変分法を適用する．こうしてわれわれは動径関数 $y(R)$ に対するシュレーディンガー方程式に導かれ，その固有値が量子数 K と n に関する分子のエネルギー準位になる（これらの準位は m_K と s に関係しない）．

この動径方程式のハミルトニアン h は §15 と同じ方法によって得られる．$H^{(0)}$ が与える寄与は $W_n(R)$ である．T_N すなわち核の運動エネルギーによる寄与を計算するには，この演算子を

$$T_\mathrm{N} = \frac{P_R^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{G}^2}{2MR^2} \tag{71}$$

（M は核の換算質量，P_R は動径運動量）の形に書き表わし，右辺の 2 項を別々に取り扱うとつごうがよい．第 1 項に関しては，容易に示されるように，

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2} + w'_n(R) \tag{72}$$

が得られる．ただし $w'_n(R)$ は小さな補正であって，K, m_K, s によらない．第 2 項すなわち回転の運動エネルギーを表わす項の寄与に対しては，さらに注意深く吟味する必要がある．これはベクトル (70) の部分空間における演算子 $\boldsymbol{G}^2$ の平均値に $\hbar^2/2MR^2$ を掛けた積に等しい．定義 (67) を思い出せば，つぎのように書きかえることができる：

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{G}^2\rangle &= \langle(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{L})^2\rangle \\ &= \hbar^2 K(K+1) - 2\langle \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{L}\rangle + \langle \boldsymbol{L}^2\rangle.\end{aligned}$$

状態 $|K m_K n s R\rangle$ は L_u の固有状態であるから，u に垂直な軸の方向にとった $\boldsymbol{L}$ の成分の平均値はすべて 0 である．このことから，(68) を考慮して，

$$\langle \boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{L}\rangle = \langle K_u L_u\rangle = \langle L_u^2\rangle = \hbar^2 \Lambda^2.$$

$\langle \boldsymbol{L}^2\rangle$ について言えば，これは n だけによって決まる一つの正の量である．$w''_n(R) \equiv (\langle \boldsymbol{L}^2\rangle - 2\hbar^2\Lambda^2)/2MR^2$ と置けば，回転の運動エネルギーによる寄与として，

$$\frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} + w''_n(R) \tag{73}$$

という式が得られる．

小さな補正 $w'_n(R)$ と $w''_n(R)$ を合わせてポテンシャル $W_n(R)$ とすることができる．このとき動径ハミルトニアンは

$$h \equiv -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2} + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} + W_n(R) \tag{74}$$

という形に表わされる．これはポテンシャル $W_n(R)$ のなかにある質量 M，角運動量 K

の1粒子の動径ハミルトニアンである.

整数 K の取りうる値〔の範囲〕は n に依存することに注意する. 実際 $K \geqslant |K_u|$ が成り立つ. n したがって Λ が与えられると, $|K_u| = |L_u| = \Lambda$ であるから, さきの条件により

$$K \geqslant \Lambda \tag{75}$$

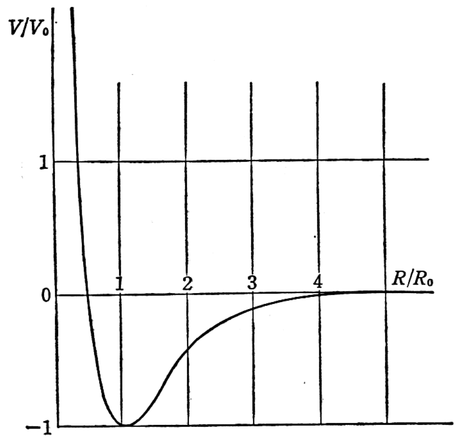
が得られる.

エネルギー E の準位は h の固有値であり, 動径方程式

$$h\,y(R) = E\,y(R)$$

を解くことによって求められる. 与えられた K と n に対して, これらはポテンシャル $W_n(R)$ のなかにある質量 M, 角運動量 K の1粒子の準位である. これらを互いに区別するために, 第3の量子数を使ってこれを v で表わす. n は電子の量子数, v は振動の量子数, K は回転の量子数である.

こうして得られるスペクトルの本質的な性格は, $W_n(R)$ の一般的な挙動によって決まる. この関数は, 核間距離の一つの値 R_0 において鋭い最小値をとり, この R_0 は分子の安定な平衡の位置に対応する. 実験の示すところによれば, 多くの場合 $W_n(R)$ は平衡の位置の近くで, モースのポテンシャル (18•2図と問題5) によって表わされ, 近似は非常



18•2図 モースのポテンシャル $V = V_0(e^{-2(R-R_0)/b} - 2e^{-(R-R_0)/b})$. R_0 は平衡状態における核間距離, V_0 は平衡点におけるポテンシャルの深さ. 比 b/R_0 が小さいほど最小値は鋭くなる. 図で採用した値は $b/R_0 = 0.68$ であり, これは水素分子に対応する.

に良い．最も低い準位に対しては，固有関数 $y(R)$ が R_0 を含む（ひろがりが κR_0 ぐらいの）小さな領域に実質上集中しており，この平衡の位置のまわりで振動する核の状態を表わす．

第1近似（調和近似）としては，遠心力によるエネルギーの項のなかの R を R_0 に置き換え，$W_n(R)$ のところには $q \equiv R - R_0$ によるそのべき級数展開の最初の2項を代入することができる．このとき記号

$$B_n = \hbar^2/2MR_0^2, \qquad W_n(R_0) = E_n, \qquad W''_n(R) = M\omega_n^2$$

を使えば，動径方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dq^2} + E_n + \frac{1}{2}M\omega_n^2 q^2 + B_n K(K+1)\right] y = E_{nvK}\, y$$

が得られる．これは調和振動子のシュレーディンガー方程式である．したがって

$$E_{nvK} = E_n + \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_n + K(K+1)B_n \tag{76}$$

$$(v = 0, 1, 2, \cdots;\ K = \Lambda, \Lambda+1, \Lambda+2, \cdots)$$

が成り立つ．このようにエネルギーは三つの項，すなわち電子のエネルギー E_n，振動のエネルギー $(v+1/2)\hbar\omega_n$，回転のエネルギー $K(K+1)B_n$ の和である．量子 $\hbar\omega_n$ と B_n に対してはちょうどよい大きさの程度が得られ，§12の解析と，分子スペクトルの構造に関してそれから引き出された諸結果がうまく立証される (12).

ここでは，スピンが存在するときこの考察にどのような修正をすればよいかということまでは立ち入らない．

ただスピンと核の統計とに結びついた驚くべき事実を一つ指摘しておく．核のスピンと残りの粒子とのあいだの相互作用はまったく無視できるから，ただ一つの効果は各準位に対するスピンの縮退すなわち多重性の存在である．分子の固有関数は

$$\Psi = \Phi(\boldsymbol{R}, x)\chi(\mu_1, \mu_2)$$

という形に書き表わされ，縮退の位数は関数 $\chi(\mu_1, \mu_2)$ のなかからとりうる線形独立なものの個数に等しい．二つの核のスピンをそれぞれ j_1，j_2 とすると，全部で $(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ 個の関数 χ が存在する．二つの核が異なるときには，Ψ に課せられる制限がなく，各準位の多重度は $(2j_1+1)(2j_2+1)$ に等しい．反対にこれらがスピン $j(j_1 =$

---

(12) 水素分子の基底電子状態（Σ^+ 状態）に対しては，初めのいくつかの準位がこの公式によって正確に表わされる．ただし $E_0 = -4.72\,\mathrm{eV}$，$\hbar\omega_0 = 0.54\,\mathrm{eV}$，$B_0 = 0.0074\,\mathrm{eV}$ とする．これらのデータは平衡状態の核間距離 $R_0 = 0.74\times10^{-8}\,\mathrm{cm}$ に対応する．$W_0(R)$ としてモースのポテンシャルをとり，$V_0 = 4.72\,\mathrm{eV}$，$R_0 = 0.74\times10^{-8}\,\mathrm{cm}$，$b = 0.68\,R_0$ (18・2図および問題5を参照せよ）とすれば，振動と回転のスペクトルに対していっそう良い表現が得られる．この分子の解離エネルギーは $V_0 - \hbar\omega_0/2$ である．

$j_2=j$) をもつ二つの同種核であるときには，それがボース粒子であるかフェルミ粒子であるかにより，言いかえれば j が整数であるか半整数であるかによって，Ψ は核の交換 ($\boldsymbol{R}\leftrightarrow-\boldsymbol{R}, \mu_1\leftrightarrow\mu_2$) に対して対称または反対称でなければならない．ところで，関数 χ のつくる $(2j+1)^2$ 次元空間においては，$(j+1)(2j+1)$ 個の対称な関数と $j(2j+1)$ 個の反対称な関数をつくることができる (第13章，問題13)．それゆえ，$\Psi(\boldsymbol{R}, x)$ が対称であるか反対称であるかにより，言いかえれば核だけの反転に関し Φ が偶関数であるか奇関数であるかによって，多重度 g は違ってくる．この変換に関する Φ の偶奇性を ϖ $(=\pm 1)$ で表わせば，

$$g=\begin{cases} \overset{(j\text{ が整数})}{(j+1)(2j+1)} & \overset{(j\text{ が半整数})}{j(2j+1)} & (\varpi=+1\text{ のとき}) \\ j(2j+1) & (j+1)(2j+1) & (\varpi=-1\text{ のとき}) \end{cases}$$

が成り立つ．ϖ が全軌道角運動量の偶奇性によって決まるということから，興味のある結果が出てくる．実際，

$$\varpi=(-)^K\varpi_e$$

であり，$\varpi_e(=\pm 1)$ は Φ に対応する電子の波動関数の反転に関する性質によって決まることが示される．$\Lambda\neq 0$ ならば，各準位に対して電子の波動関数が二つ存在して反対符号の ϖ_e をもつ．これに反して Σ 準位 ($\Lambda=0$) に対しては，電子の波動関数が一つしかなく，ϖ_e は $+1$ か -1 のはっきり決まった値をとり，多重度 g はいつも回転の準位に特有の形で変化する ([13])．

同種核2原子分子の Σ 準位のエネルギー・スペクトルがもつこれらの特徴は，これらの分子の《帯スペクトル》の構造を調べるとき容易に明らかにされる．異なるスピン関数をもつ状態のあいだの遷移は，ごく小さい確率でしか起こらないから，実際に観測される遷移は K の偶奇性を保存する．さらに，普通の観測の条件では，K の偶数値に対する線と K の奇数値に対する線の相対的な強さは，上に計算した多重度の比に直接結びつけられる．すなわち，ϖ_e の符号と，核がボース粒子であるかフェルミ粒子であるかにより，$(j+1)/j$ または $j/(j+1)$ である．このことから，核のスピンの測定に対して特に直接的な一つの方法が得られる．

演 習 と 問 題

1. 与えられた量子系のエネルギーを E_0 とし，基底状態の波動関数を Ψ_0 とする．変分の計算によりエネルギー $E_{\text{var.}}$ と波動関数 $\Psi_{\text{var.}}$ が与えられている．Ψ_0 と $\Psi_{\text{var.}}$ は1に規格化されているとして，$\varepsilon=1-|\langle\Psi_0|\Psi_{\text{var.}}\rangle|^2$ と置く．ε は Ψ_0 に直交する部分

([13]) 特に $j=0$ のときには，$\varpi=-1$ の準位はなくなり，K は偶数だけまたは奇数だけをとりうる．

空間に落とした $\Psi_{\text{var.}}$ の射影のノルムであり，状態 $\Psi_{\text{var.}}$ から状態 Ψ_0 までの距離の二乗を測る尺度の一つである．このとき不等式

$$E_{\text{var.}} - E_0 \geqslant \varepsilon(E_1 - E_0)$$

を証明せよ（E_1 は最初の励起状態のエネルギー）．§4の計算の結果がこの不等式をうまく満たしていることを確かめ，このことについて論ぜよ．

2.　水素原子の基底状態の波動関数が知られているとして，最初の励起 s 状態の準位を計算する．そのため，基底状態の波動関数に直交する方向の関数 $u = \rho e^{-b\rho}$ の成分をとり，これを試験関数として用いよ（§4の記号）．これを厳密な固有値および固有関数と比較して論ぜよ．

3.　不等式（11）と（12）を証明せよ．

4.　試験関数として $u = \rho^{l+1} e^{-b\rho}$ をとり（§4の記号），角運動量 l の準位のなかで最も低い水素原子のエネルギー準位を計算せよ．これを厳密な結果と比較して解説せよ．

5.　ポテンシャル

$$V(q) = V_0[e^{-2q/b} - 2e^{-q/b}]$$

（モースのポテンシャル）のなかにある質量 M の1次元粒子を考える．エネルギー準位と対応する波動関数とを決定せよ．

注意；　$K_0 = \sqrt{2MV_0}/\hbar, \quad \kappa = \sqrt{-2ME}/\hbar$

と置いて，変数と関数の変換

$$\xi = 2K_0 b e^{-q/b}, \qquad w(\xi) = e^{\xi/2 - \kappa b}\phi(q)$$

を施せば，波動方程式はラプラスの方程式に帰着する．その結果，整数 n の添字によってしるしづけられた有限個のとびとびの準位がつぎの公式によって与えられる：

$$E_n = -V_0\left(1 - \frac{n+\frac{1}{2}}{K_0 b}\right)^2 \qquad \left(0 \leqslant n \leqslant K_0 b - \frac{1}{2}\right).$$

第19章　衝突の理論

§1. 序　　説

今までのところ，われわれが取り扱ってきた衝突の問題は最も簡単なものに限られていた．すなわち，一つのポテンシャル，特に中心力ポテンシャルによる一つの素粒子の散乱と，二つの素粒子の相互散乱である．あとの問題はまた，相対運動と重心の運動を分離することにより，前の問題に帰着させられる．この型の問題の取り扱いに関する本質的な部分は第10章で与えられている．それを補うのはクーロン散乱の処理（第11章，第II節）と二つの同種粒子の相互散乱の処理（第14章，§9，10）である．さらに，第17章§5においては，ポテンシャル $V(r)$ による1粒子の散乱に対して特に簡単な式が得られている．この際われわれは $V(r)$ を一つの摂動として取り扱い，第1次の効果だけを求めたのである（第17章 (54)）．しかし，第17章§5の議論は断面積に基づいており，これの定義には批判の余地が残されているから，上記の公式には厳密な証明を与えることが望ましい．

この章の目的は，一方において一つの形式論をつくり上げ，それによって複雑な粒子のあいだの衝突の問題を処理できるようにすること，他方においては，前の数章で説明した方法，すなわち摂動法と変分法を衝突断面積の計算にまでおしひろげることである．

これらの問題に近づくには，二つの異なる方法がある．第一の方法は，断面積を単位時間と単位入射流束に対する確率とみなして，第17章§5の定義を厳密に正当化したのち，これらを $t \to +\infty$ と $t' \to -\infty$ の極限における時間的変化の演算子 $U(t, t')$ の行列要素に結びつけるのである．第二の方法は第10章（第I節）の取り扱い方をそのまま拡張するものであり，それによると，断面積は直接にシュレーディンガー方程式の定常解の漸近的挙動に結びつけられる．明らかにこれら二つの処理法は同値であるが，この章で採用するのは第二の方法である [1]．

この章は五つの節から成る．初めの2節は形式論の建設と，ポテンシャル $V(r)$ のなか

---

[1] 第一の方法の解説については，B. LIPPMANN と J. SCHWINGER, *Phys. Rev.*, **79** (1949), 469 または M. GELL-MANN と M. L. GOLDBERGER, *Phys. Rev.*, **91** (1953), 398 を見よ．これら二つの解説において採用された断面積の定義は，どちらの場合も，批判の余地がまったくないとは言えない．この点に関する議論と，これに対してとりうる救済策は S. SUNAKAWA, *Prog. Theor. Phys.*, **14** (1955), 175 に与えられている．

の1粒子という簡単な場合における摂動法の解説に当てられる．複雑な衝突への拡張は第Ⅲ節で与えられる．第Ⅳ節は変分法に当てられる．第Ⅴ節では，衝突を支配するハミルトニアンのごく一般的な性質，たとえばエルミート性，時間反転による不変性やその他の不変性から出てくる衝突振幅の性質がいくつか与えられる．

Ⅰ．自由波のグリーン関数とボルン近似

§2.　散乱振幅の積分表示

この節とつぎの節では，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ による質量 m の1粒子の散乱の問題を論じる．われわれは運動エネルギーを H_0 で表わし，全ハミルトニアンを H とする．すなわち

$$H_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle \tag{1}$$

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

である．

ポテンシャル V は漸近的に $1/r$ より速く0に近づくと仮定する．ポテンシャルが $1/r$ の場合は§15で簡単に吟味されよう．

これからあとの議論には，いろいろな型の波動が入ってくるので，適当な記号によってはっきり区別するとつごうがよい．われわれは今後文字 φ を平面波のために，文字 ψ をハミルトニアン H の定常解のためにとっておく．特に波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ を与えると，つぎの波動が定められる：

i)　平面波 $\varphi_{\boldsymbol{k}} \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$,

ii)　定常波 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ と $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$．　これらはそれぞれ $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ +(出てゆく波)，および，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ +(入ってくる波）という漸近的挙動によって特徴づけられる．

特に，$\boldsymbol{k}_a$ が入射粒子の波数ベクトルであり，E がそのエネルギーであるとき $(k_a = k = (2mE)^{1/2})$，散乱の定常波（第10章，§3の定義）は波動 $\psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}$ である．この波はそれに対応する散乱の振幅 $f_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}$ とともに条件

$$H\psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)} = E\psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}, \qquad \psi_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + f_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3}$$

によって定められる．方向 Ω_b の散乱断面積を $\mathrm{d}\sigma_{a\to b}/\mathrm{d}\Omega$ で表わす．第10章において，

$$\mathrm{d}\sigma_{a\to b}/\mathrm{d}\Omega = |f_{\boldsymbol{k}_a}^{(+)}(\Omega_b)|^2 \tag{4}$$

であることが示されている．

方向 Ω_b を向いた長さ k のベクトルを $\boldsymbol{k}_b$ とする．この節を通じて取り扱う定常波は，$\boldsymbol{k}_a$ と $\boldsymbol{k}_b$ によって定められるものに限られる．書き方を簡明にするため，添字として $\boldsymbol{k}_a$，$\boldsymbol{k}_b$ を付けるときには，いつでもそれぞれ添字 a，b に置き換える．

さて，この研究を始めるに当たって，まず散乱振幅のごく一般的な性質を述べることにしよう．二つのポテンシャル $U(\boldsymbol{r})$，$\hat{U}(\boldsymbol{r})$ を考え，対応するハミルトニアンの定常解をそれぞれ $\xi, \hat{\xi}$ で表わす．われわれがとりわけ関心をもつのは解 $\hat{\xi}_b^{(-)}$ と $\xi_a^{(+)}$ である．すなわち

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+\hat{U}\right]\hat{\xi}_b^{(-)}=E\hat{\xi}_b^{(-)} \tag{5}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+U\right]\xi_a^{(+)}=E\xi_a^{(+)} \tag{6}$$

$$\hat{\xi}_b^{(-)}\underset{r\to\infty}{\sim}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{r}}+\hat{f}_b^{(-)}(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r} \tag{7}$$

$$\xi_a^{(+)}\underset{r\to\infty}{\sim}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}+f_a^{(+)}(\Omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{8}$$

が成り立つ．つぎのことを示そう：

$$\begin{aligned}\langle\hat{\xi}_b^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi_a^{(+)}\rangle&\equiv\int\hat{\xi}_b^{(-)*}(\boldsymbol{r})[U(\boldsymbol{r})-\hat{U}(\boldsymbol{r})]\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=-\frac{2\pi\hbar^2}{m}[f_a^{(+)}(\Omega_b)-\hat{f}_b^{(-)*}(-\Omega_a)]\end{aligned} \tag{9}$$

$(-\Omega_a$ によって Ω_a と反対の向きを表わすことにする)．

この証明には，第10章 §17 で位相のずれに対する積分表示を求めるために用いた方法と同じような筋道をたどる．混乱を起こす心配がまったくないときには，場合により添字 a，b と記号 ^ を省略する．さて (6) の両辺に $\xi^{(-)*}$ を掛け，(5) の両辺の複素共役に $\xi^{(+)}$ を掛けてから両辺の差をとる．$\hat{U}$ は実数であるから，結果は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\xi^{(-)*}(\triangle\xi^{(+)})-(\triangle\xi^{(-)*})\xi^{(+)}]+\xi^{(-)*}(U-\hat{U})\xi^{(+)}=0$$

となる．原点を中心とする半径 R の球の内部でこれを積分することにより，

$$\langle\xi^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi^{(+)}\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{R\to\infty}\int_{r<R}[\xi^{(-)*}(\triangle\xi^{(+)})-(\triangle\xi^{(-)*})\xi^{(+)}]\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{10}$$

が導かれる．$\triangle$ はエルミートであるにもかかわらず，関数 ξ は二乗積分可能でないから，右辺の積分はこの極限において 0 になるとは限らない．これを計算するためにグリーンの定理を使って，半径 R の球面上の積分になおす．

ξ_1 と ξ_2 が $\boldsymbol{r}$ の関数であるとき，この球面における《動径ロンスキアン》

$$W[\xi_1, \xi_2] \equiv \xi_1 \frac{\partial \xi_2}{\partial r} - \xi_2 \frac{\partial \xi_1}{\partial r}$$

の積分を表わすために，今後は記号 $\{\xi_1, \xi_2\}$ を用いる．すなわち

$$\{\xi_1, \xi_2\} \equiv \int W[\xi_1, \xi_2]\Big|_{r=R} R^2 \mathrm{d}\Omega \equiv \int W[r\xi_1, r\xi_2]\Big|_{r=R} \mathrm{d}\Omega. \tag{11}$$

グリーンの定理によれば，

$$\{\xi_1, \xi_2\} = \int_{r<R} [\xi_1(\triangle\xi_2) - (\triangle\xi_1)\xi_2]\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

したがって (10) から

$$\langle\xi^{(-)}|(U-\hat{U})|\xi^{(+)}\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \lim_{R\to\infty} \{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\} \tag{12}$$

が得られる．面積分 $\{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\}$ は漸近的にある定数に近づく．関数 ξ とその動径導関数を $1/r$ の累乗によって漸近展開し，その第1項だけを残せば，この定数を容易に決めることができる．(7) と (8) を代入して，

$$\lim_{R\to\infty} \{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\} = \lim_{R\to\infty} \{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{r}}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}\} + \lim_{R\to\infty} \left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{r}}, f^{(+)}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\right\}$$
$$+ \lim_{R\to\infty} \left\{f^{(-)*}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}\right\} + \lim_{R\to\infty} \left\{f^{(-)*}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, f^{(+)}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\right\} \tag{13}$$

が得られる．平面波の漸近式は関係

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{2\pi}{\mathrm{i}kr}[\delta(\Omega_r - \Omega_k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} - \delta(\Omega_r + \Omega_k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}] + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \tag{14}$$

によって与えられる（問題1）．右辺の角括弧のなかで，Ω_r と Ω_k はそれぞれベクトル $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{k}$ の方向を表わす．関数 δ は，方向 Ω の任意の関数 φ に対して成り立つ性質

$$\int \delta(\Omega' - \Omega)\varphi(\Omega')\mathrm{d}\Omega' = \varphi(\Omega)$$

によって定義される．(13) の右辺の各平面波を対応する漸近式に置き換えれば，角に関する積分は容易に計算される．$\boldsymbol{k}_b$ と $\boldsymbol{k}_a$ は同じ長さをもつから，第1項は厳密に0である（問題2に述べた性質と一致する）．第2項において0でない寄与をもたらすのは，平面波のうちの入ってくる波の部分だけであり，それは $-4\pi f^{(+)}(\Omega_b)$ に等しい．同じ注意が第3項にも当てはまり，その寄与は $4\pi f^{(-)*}(-\Omega_a)$ に等しい．第4項は0である．したがって

$$\lim_{R\to\infty} \{\xi^{(-)*}, \xi^{(+)}\} = -4\pi[f^{(+)}(\Omega_b) - f^{(-)*}(-\Omega_a)]$$

が成り立つ．この結果を (12) に入れると，関係 (9) が得られる．　　（証明終）

性質 (9) の興味深いところは，主としてこれがポテンシャル U と $\hat{U}$ の特殊な形によ

らないという点である．これらのポテンシャルに課せられた条件は，ただ実であることと $1/r$ より速く漸近的に減少することだけである．

第一の応用として，

$$U = V, \qquad \hat{U} = 0$$

と置くと，(9) は

$$\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_a^{(+)}(\Omega_b) \tag{15}$$

となる．散乱振幅のこのような積分表示は，つぎの§3, 4 において，ボルン近似の出発点として利用されよう．

今度は

$$U = \hat{U} = V$$

と置くと，(9) の左辺は 0 になるから，右辺に現われる二つの振幅は等しい．すなわち

$$f_a^{(+)}(\Omega_b) = f_b^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{16}$$

最後に

$$U = 0, \qquad \hat{U} = V$$

と置くと，(9) は

$$\langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f_b^{(-)*}(-\Omega_a) \tag{17}$$

となる．(15)，(16)，(17) をつき合わせて，重要な等式

$$\langle \psi_b^{(-)} | V | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle \tag{18}$$

を得る．

§3．断面積と T 行列．微視的可逆性

公式 (4) において散乱振幅をその積分表示 (15) に置き換えると，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle|^2$$

となる．第 17 章の式 (54) を思い出させる形に上の式を書き表わすため，第 17 章 §5 の定義（第 17 章 (52)）にしたがって状態の密度

$$\rho(E) = (2\pi\hbar)^{-3} p^2 (\mathrm{d}p/\mathrm{d}E) = m\hbar k/(2\pi\hbar)^3$$

を導入し，入射速度を v で表わす．すなわち $v = \hbar k/m$．このとき上の等式は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v} |\langle \varphi_b | V | \psi_a^{(+)} \rangle|^2 \rho(E) \tag{19}$$

という形に書き表わされる[2].

厳密に言うと，$\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle$ は演算子 V の行列要素ではない．$|\psi_a^{(+)}\rangle$ と $|\varphi_b\rangle$ が同じ表現の基底ベクトルになりえないからである．しかし

$$T_{a\to b}\equiv\langle\varphi_b|T|\varphi_a\rangle=\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle \tag{20}$$

となるような行列 T を導入するとつごうがよい．これを遷移行列と呼び，要素 $T_{a\to b}$ を遷移 $a\to b$ の振幅という．これらの行列要素は，同じエネルギーをもつ平面波のあいだでとられることに注意する．条件 (20) に適するヒルベルト空間の演算子 T を思い浮かべることはもちろんできるが，この条件は T を完全に決めるものではない．平面波を基底の関数とする表現において，この条件は行列要素の一部分，すなわちはっきり決まったエネルギーをもつ波のあいだの行列要素を定める．しかし T を完全に決めるためには，E と異なるエネルギーをもつ平面波のあいだの行列要素をも定める必要がある．その定義についてはのちに詳しく述べる．

こうすれば，(19) は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{2\pi}{\hbar v}|T_{a\to b}|^2\rho(E) \tag{19'}$$

という形に書き表わされる．

さきへ進む前に，微視的可逆性ということに触れておく．運動量 $-\boldsymbol{k}_a$，$-\boldsymbol{k}_b$ に対応する各種の波にそれぞれ添字 Ka，Kb をつける．平面波のあいだでは明らかに

$$\varphi_{-\boldsymbol{k}}=\varphi_{\boldsymbol{k}}^*$$

という関係が成り立つ．また，ハミルトニアン H は実であるから，

$$\psi_{-\boldsymbol{k}}^{(\mp)}=\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)*}.$$

特に，

$$\varphi_a=\varphi_{Ka}^*,\qquad \psi_b^{(-)}=\psi_{Kb}^{(+)*}$$

であり，V が実であるから，《行列要素》$\langle\psi_b^{(-)}|V|\varphi_a\rangle$ と $\langle\varphi_{Ka}|V|\psi_{Kb}^{(+)}\rangle$ は同じ積分を表わす．それゆえ関係 (18) はまた

$$\langle\varphi_{Ka}|V|\psi_{Kb}^{(+)}\rangle=\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle$$

とも書き表わされ，さらに定義 (20) によれば，

$$T_{Kb\to Ka}=T_{a\to b} \tag{21}$$

となる．それゆえ当然のこととして，これら二つの振幅の大きさは等しい．公式 (19′) を思い出せば，このことから弾性散乱に対する微視的可逆性

$$\mathrm{d}\sigma_{Kb\to Ka}/\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}\sigma_{a\to b}/\mathrm{d}\Omega \tag{22}$$

---

[2] もう一つの方法で衝突の理論を定式化するときには（脚注[1]の参考文献を参照），この式は断面積の定義そのものからごく自然な形で出てくる．

が導き出される [3].

§4. ボルン近似

公式 (19) は厳密に正確である．これを導き出す根拠となった第10章の公式 (2) と同じく，これは断面積を散乱定常波 $\psi_a^{(+)}$ に結びつけている．今の場合，この波は漸近式としてではなく，積分内の因数として入ってくる．この積分のなかでこれを近くの波に置き換えると，断面積に対する近似式が得られる．

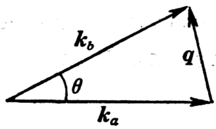
特に，$V(\boldsymbol{r})$ が十分小さいときには，波 $\psi_a^{(+)}$ は入射平面波 φ_a とわずかしか違わないから，遷移振幅の計算の際 φ_a に置き換えられる．これが**ボルン近似**

$$T_{a\to b} \simeq T_{a\to b}^{(\mathrm{B})} = \langle \varphi_b | V | \varphi_a \rangle \tag{23}$$

である．この近似によって，公式 (19) は第17章の公式 (54) に帰着する．こういうわけで，$V(\boldsymbol{r})$ が摂動として取り扱われるような極限においては，後者は確かに断面積の近似式とみなされる．

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_b - \boldsymbol{k}_a$$

と置けば，$\hbar\boldsymbol{q}$ は衝突の過程でポテンシャルから粒子へ移される運動量である (19·1 図)．このベクトルの長さは散乱角 θ——$\boldsymbol{k}_a$ と $\boldsymbol{k}_b$ のあいだにつくられる角——とともに増加し，両者の関係は



19·1図

$$q = 2k \sin\frac{1}{2}\theta \qquad (k = k_a = k_b) \tag{24}$$

である．(23) から

$$T_{a\to b}^{(\mathrm{B})} = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} V(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \equiv \mathcal{V}(\boldsymbol{q}) \tag{25}$$

が導かれる．

したがって，散乱断面積はボルン近似によるとき，特に簡単な形

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}^{(\mathrm{B})}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |\mathcal{V}(\boldsymbol{q})|^2 \tag{26}$$

に書き表わされる．これは，衝突の際に移される運動量に関する $V(\boldsymbol{r})$ のフーリエ成分の絶対値の二乗に比例する．この量がベクトル $\boldsymbol{q}$ だけを媒介にして，エネルギーおよび角に依存していることは注目される．

ポテンシャルが中心力による場合，事柄はいっそう簡単になる．角についての積分を済

(3) ポテンシャルが中心力によるものであれば，この性質はまた回転による不変性からも導き出される．しかしわれわれがここで知ったのは，中心力によらないポテンシャルに対してもこれが成り立つことである．

ませると，(25) の第2辺は

$$\mathcal{V}(q)=\frac{1}{q}\int_0^\infty \sin qr\, V(r)r\,\mathrm{d}r \tag{27}$$

という形に書き表わされる．このとき微分断面積は移される運動量の大きさ $\hbar q$ だけによって決まる．全微分断面積 $\sigma_{\mathrm{tot.}}$ については，積分変数として θ の代りに q をとれば $(0\leqslant q\leqslant 2k,\ q\,\mathrm{d}q=k^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta)$,

$$\sigma_{\mathrm{tot.}}^{(\mathrm{B})}=\frac{m^2}{2\pi\hbar^4k^2}\int_0^{2k}\mathcal{V}^2(q)q\,\mathrm{d}q \tag{28}$$

という形に書き表わされる．

これらの式から，高エネルギーにおける断面積の挙動に関して，一般的な種類の結果がいくつか引き出される．ポテンシャル $V(r)$ の有効距離を a で表わす．実関数 $V(r)$ は，1次元の大きさ a をもつ領域でしか目立った値をとらないから，そのフーリエ変換が目立った値をとるのは，原点のまわりで1次元の大きさ $1/a$ をもつ領域のなかだけである [4].

それゆえ断面積が相対的に重要なのは，領域 $q\lesssim 1/a$ のなかだけである．関係 (24) により，この領域は

$$\sin\frac{1}{2}\theta\lesssim\frac{1}{2ka}$$

の範囲にある散乱角に対応する．高エネルギー $(ka\gg 1)$ の場合，これは実質的には前方に集中し，角のひろがり $1/ka$ 程度の領域〔頂角 $2/ka$ の円錐〕にある．ボルン近似に基づくこれらの結果は，高エネルギーでの剛体球による散乱に関して第10章 §13で得られた諸結果と比較されよう．

全断面積について言えば，これは $1/E$ と同じように0に近づく．この結果は，(28) を調べれば明らかである．(28) から漸近式

$$\sigma_{\mathrm{tot.}}^{(\mathrm{B})}\underset{k\to\infty}{\sim}\frac{m^2}{2\pi\hbar^4k^2}\int_0^{\infty}\mathcal{V}^2(q)q\,\mathrm{d}q \tag{29}$$

が得られる．これを中心力によらないポテンシャルに拡張するのはやさしい．

§5. 散乱の積分方程式

今までのところ，波 $\psi_a^{(+)}$ はシュレーディンガー方程式の解で，いくつかの境界条件を満たすものと定められてきた．これがまたある積分方程式の解になっていることを示そ

---

(4) ここの議論では，a として分布

$$V^2(\boldsymbol{r})\Big/\int V^2(\boldsymbol{r}')\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

の標準偏差と同じ程度の長さをとる．

う．この新しい定義によって，われわれは $\varphi_a^{(+)}$ を V のべき級数展開の形に書き，ボルン近似に対する補正を評価することができる．

このために等式

$$(\triangle + k^2)\frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi\,\delta(\boldsymbol{r})$$

を利用する (5)．これにより，関数

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{30}$$

はつぎの性質をもつ：

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle + k^2)\mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{31}$$

これはエネルギー $E = \hbar^2 k^2/2m$ に対する自由粒子のグリーン関数である．これの複素共役関数も同じ性質をもつ．

さて，波 $\varphi_a^{(+)}$ のシュレーディンガー方程式は

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle + k^2)\varphi = V\varphi \tag{32}$$

と書かれる．しばらくは関数 $F(\boldsymbol{r}) \equiv V(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})$ が与えられていると考えよう．このとき方程式 (32) は一つの非同次偏微分方程式とみなされる．性質 (31) により，関数

$$\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}) \equiv \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')F(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}'$$

は方程式 (32) の特殊解である．一般解を得るには，同次方程式の一般解をこれに付け加えればよい．言いかえると，φ が方程式 (32) を満たすならば，$\varphi - \hat{\varphi}$ は同じエネルギーをもつ自由波の一つ，すなわち

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle + k^2)(\varphi - \hat{\varphi}) = 0 \tag{33}$$

であり，逆も成り立つ．

この自由波を決めてしまうためには，その漸近的挙動を知ればよい．漸近的に $\hat{\varphi}$ は，純粋に出てゆく波に近づくことを示そう．そのためには表示式 (30) にもどる．

---

(5) （シュワルツの意味における）超関数とみなすとき，e^{ikr}/r は何回でも微分可能である．そのラプラシアンを計算するには，等式

$$\triangle(1/r) = -4\pi\,\delta(\boldsymbol{r})$$

と，積の微分法に関する性質

$$\triangle(fg) = (\triangle f)g + 2(\nabla f)\cdot(\nabla g) + f(\triangle g)$$

を使えばよい．

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\equiv r\left[1-2\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}{r^2}+\frac{r'^2}{r^2}\right]^{1/2}\underset{r\to\infty}{\sim} r-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{r}'+O\left(\frac{r'}{r}\right)$$

であるから，$r\gg r'$ となる極限において，

$$\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}+O\left(\frac{r'}{r}\right)\qquad(\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r)\tag{34}$$

が成り立ち，これから

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\underset{r\to\infty}{\sim}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\tag{35}$$

となる．これはポテンシャルの有効距離よりも r がずっと大きい ($r\gg a$) ときに成り立つ式である．したがって，波 ψ が漸近的に (3) の形に近づくならば，$\psi-\hat{\psi}$ の漸近的挙動もまた ($\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}$ + 出てゆく波) の形をしている．この関数は方程式 (33) を満たすから必ず平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}$ である．それゆえ

$$\psi_a^{(+)}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\tag{36}$$

が成り立つ．条件 (3) から方程式 (36) が導かれ，逆も成り立つ．(36) は散乱の積分方程式と呼ばれる．

$\psi_a^{(+)}$ の漸近的挙動は方程式 (36) の右辺から直接に読みとられる．それには関係 (35) を参照すればよい．その結果，性質 (15) がもう一度得られる．

上に述べた手続きは，グリーン関数のところにその複素共役 $\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ を代入して繰り返される．$\mathcal{G}^*$ もまた自由粒子のグリーン関数であるが，入ってくる波の漸近的挙動に対応するものである．こうして積分方程式

$$\psi_a^{(-)}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(-)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\tag{37}$$

が得られる．

§6. ボルン展開

方程式 (36) と (37) は反復法によって解くことができる．その方法は，時間を含む摂動の問題に対する第17章の積分方程式 (13) を解くのに使った方法と同様である．

特に方程式 (36) をとりあげる．右辺の積分のなかの $\psi_a^{(+)}$ のところに平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}$ を代入すれば，

$$\psi_1^{(+)}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}+\int\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

が得られる．波 $\psi_1^{(+)}$ を代入すれば，

$$\psi_2^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi_1^{(+)}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'$$

となる．波 $\psi_2^{(+)}$ を代入すれば，新しい波 $\psi_3^{(+)}$ を得る．以下同様である．こうして得られる関数の列は，うまくいけば厳密解 $\psi_a^{(+)}$ に収束し，このとき $\psi_a^{(+)}$ は V のべきによる展開式によって表わされる．すなわち，

$$K_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}'),$$
$$K_n(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \int K_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'')K_{n-1}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'' \qquad (n>1)$$

と置くとき，

$$\psi_a^{(+)} = e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + \sum_{n=1}^{\infty}\int K_n(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}'}d\boldsymbol{r}'. \tag{38}$$

これが散乱定常波の**ボルン展開**である．

積分 $\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle$ のなかの関数 $\psi_a^{(+)}$ のところにそのボルン展開を代入すれば，$T_{a\to b}$ に対する同様な展開が得られる．すなわち V のべきによる展開である．これは V が十分小さいとき収束する [6]．ボルン近似は，その第1項だけをとることに当たる．

§ 7. ボルン近似が有効であるための判定条件

ボルン近似が成り立つためには，$T_{a\to b}$ の計算の際 $\psi_a^{(+)}$ を平面波 φ_a に置き換えることによって生じる誤差が無視される程度でなければならない．それゆえ，ポテンシャル V の支配する領域で厳密な定常波が平面波とすこししか違わないということが必要である．

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \equiv \psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) - e^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}}$$

と置くとき，(V が相対的に重要なすべての点 $\boldsymbol{r}$ において)

$$|\psi'(\boldsymbol{r})| \ll 1 \tag{39}$$

という条件が得られる．

ψ' を評価するには，これをボルン展開して最低次の項をとればよい．$\hat{\boldsymbol{k}}_a$ を z 軸の向きにとり，自明な変数変換〔$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}$〕を施せば，

$$\psi'(\boldsymbol{r}) \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2}e^{ikz}I(\boldsymbol{r}), \qquad I(\boldsymbol{r}) \equiv \int e^{ik(R+Z)}V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})d\boldsymbol{R}/R$$

---

[6] ボルン展開の収束に関する研究については，R. JOST と A. PAIS, *Phys. Rev.*, **82** (1951), 840; W. KOHN, *Rev. Mod. Phys.*, **26** (1954), 292 を参照．時間を含む摂動法に入ってくる積分方程式 (第17章) はボルテラ型である．この場合，もしも $U^{(0)}$ と V が演算子でなく，関数であるとすれば，これから反復法によって導き出される U の展開はつねに収束する．それゆえ，発散の原因となりうるのは，$U^{(0)}$ と V がヒルベルト空間の演算子であるという事実だけである．これに反して，われわれがここで取り扱っている積分方程式はフレドホルム型であるから，ボルン展開はつねに収束するとは限らない．

が得られる．

指数関数のなかに k があるから，$|I|$ はエネルギーに依存する．しかしながら，積分記号のなかの量を絶対値に置き換えれば，エネルギーに無関係な上の限界が得られる．すなわち

$$|I| < \int |V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})| \mathrm{d}\boldsymbol{R}/R. \tag{40}$$

ポテンシャルの有効距離を a で表わし (7)，その深さの平均を V_0 とする．われわれが関心をもつ変数 $\boldsymbol{r}$ の変域では，この上の限界はおおよそ $2\pi V_0 a^2$ に等しい．したがって，

$$V_0 \ll \hbar^2/ma^2 \tag{41}$$

ならば，どんなエネルギーについてもボルン近似は有効である．

明らかにこの条件による制限は強すぎる．関係 (40) によって定められた限界に積分 $|I|$ が到達するのは，ポテンシャルの有効な領域において因数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(R+Z)}$ が事実上一定値を保つほどエネルギーが低いとき (8)，言いかえれば $ka \ll 1$ のときに限る．逆に $ka \gg 1$ であれば，この因数は同じ領域で速く振動するから，上記の評価はきわめて控えめにすぎる．$k \to \infty$ のとき，振動はだんだん激しくなり，積分 I は 0 に近づく．それゆえ，エネルギーが十分高いときにはボルン近似が成り立つであろうと予想される．

高エネルギーにおける I の漸近的挙動は停留位相の方法によって決定することができる．〔積分に対して〕主な寄与をもたらす部分は，振動する因数の位相が停留値をとるような点をすべて含む領域，すなわち半直線 $X=Y=0,\ Z<0$ を囲む領域である．ここでは計算の詳細を省略するが (9)，結果は

$$I \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{2\pi \mathrm{i}}{k} \int_{-\infty}^{z} V(x, y, z')\mathrm{d}z' + O(k^{-2}). \tag{42}$$

それゆえ，われわれが関心をもつ $\boldsymbol{r}$ の変域では，k の大きくなる極限において $|I|$ は $2\pi V_0 a/k$ 程度の大きさである．したがって

$$ka \gg 1, \qquad V_0 \ll \hbar^2 k/ma \tag{43}$$

のとき判定条件 (39) は満たされる．

中間のエネルギーにおいて条件 (41) が満たされていないときに，ボルン近似が成り立つための判定条件を求めるためには，個々の特殊な場合について積分 I を評価しなければ

---

(7) 脚注 (4) を参照．

(8) さらに，V が一定の符号を保つという条件も必要である．詳しく言えば，

$$I(\boldsymbol{r}) \underset{k\to 0}{\sim} \int V(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{R}/R$$

が成り立つ．

(9) たとえば，L. I. Schiff, *Phys. Rev.*, **103** (1956), 443 を見よ．

ならない．実際には，ポテンシャルの領域のなかから適当に選んだ1点，たとえば点 $r=0$ における値を評価するだけで満足する．特にポテンシャルが中心力による場合は，角に関する積分をすませると，

$$I(0)=\frac{2\pi\mathrm{i}}{k}\int_0^{\infty}(1-\mathrm{e}^{2\mathrm{i}kr})V(r)\mathrm{d}r$$

が得られ，性質 (40) および (42) とよく合う．これからつぎの判定条件が出る：

$$\left|\int_0^{\infty}(1-\mathrm{e}^{2\mathrm{i}kr})V(r)\mathrm{d}r\right|\ll\hbar^2k/m. \tag{44}$$

一つの衝突において，断面積を特徴づける単位は，衝突に関与する力の有効距離 a に対して定まる**幾何学的断面積** $4\pi a^2$ である．ボルン近似が成り立つ条件の下では，この量に比して全断面積は小さい．すなわち

$$\sigma_{\text{tot.}}\ll\text{幾何学的断面積}. \tag{45}$$

$ka\ll1$ と $ka\gg1$ という二つの極限の場合に，この不等式を証明しよう．そのためには，全断面積を表わす式 (28) を使う．関数 $\mathcal{V}(q)$ の一般的な挙動はその定義（式 (25)）から導き出される．これは原点の回りの1次元の大きさ $1/a$ をもつ領域のなかにおいて $(2\pi)^{3/2}V_0a^3$ 程度であり，この領域の外部では実際上0である．これらのデータを (28) の右辺に代入すれば，

$$ka\ll1\ \text{のとき}\qquad\frac{\sigma_{\text{tot.}}^{(\mathrm{B})}}{4\pi a^2}\approx2\pi\left(\frac{V_0ma^2}{\hbar^2}\right)^2$$

$$ka\gg1\ \text{のとき}\qquad\frac{\sigma_{\text{tot.}}^{(\mathrm{B})}}{4\pi a^2}\approx\frac{1}{2}\pi\left(\frac{V_0ma}{\hbar^2k}\right)^2$$

となる．ボルン近似の成り立つ条件は，第一の場合に不等式 (41)，第二の場合に不等式 (43) である．どちらの場合にも確かに $\sigma_{\text{tot.}}^{(\mathrm{B})}/4\pi a^2\ll1$ が成り立つ．

不等式 (45) はボルン近似が成り立つための必要条件であるが，十分条件ではない．共鳴の効果——たとえば原子による遅い電子の散乱に見られるラムスアウアー＝タウンゼント効果——のため，断面積が幾何学的断面積よりはるかに小さいにもかかわらず，ボルン展開は速く収束しないということも起こる．実際には，共鳴の効果は入射エネルギーの変化に対して極端に鋭敏であるため，容易にそれと認められる．これらのことを念頭におけば，ボルン近似が成り立つかどうかを決定するとき，不等式 (45) はきわめて有用な判定条件である．

§8.　1原子による電子の弾性散乱

応用として，1原子による荷電粒子の弾性散乱を考える．ここでは取り扱い方を単純化

して，原子を一つの電荷分布のように考え，この分布によって生じる静電ポテンシャルのなかにある荷電粒子に対し，その散乱断面積を計算するのに，ボルン近似を使う．ボルン近似が成り立つ範囲にとどまる限り，この方法によって実際に正確な断面積が得られる（あとの §21 を見よ）．具体的に考えるために，入射粒子は電子であるとしよう．この場合には，入射電子と原子の電子との交換によって生じる効果を考慮する必要があろうが，われわれの取り扱いではこの種の効果を一貫して無視する．ボルン近似が成り立つようなエネルギーに対しては，いずれにせよ小さな補正の問題にすぎない．

原子は中性原子であると仮定する．また原子番号を Z とし，電子の密度を $\rho(\boldsymbol{r})$ で表わす．したがって

$$\int \rho \, \mathrm{d}\boldsymbol{r} = Z.$$

静電ポテンシャル φ はポアッソンの法則

$$\triangle\varphi = -4\pi e[Z\delta(\boldsymbol{r}) - \rho(\boldsymbol{r})] \tag{46}$$

を満たす．電子を支配するポテンシャル

$$V(\boldsymbol{r}) = -e\varphi(\boldsymbol{r})$$

も同様な法則を満たす．その法則からフーリエ変換によって

$$q^2 \mathcal{V}(\boldsymbol{q}) = 4\pi e^2[Z - F(\boldsymbol{q})] \tag{47}$$

が得られる．これは関数 $\mathcal{V}(\boldsymbol{q})$（定義は (25) あるいは (27)）と関数

$$F(q) \equiv \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \rho(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} = q^{-1}\int_0^\infty \sin qr \, \rho(r) r \, \mathrm{d}r \tag{48}$$

のあいだの関係を示す．関係 (47) を考慮すれば，ボルン近似による断面積（式 (26)）は

$$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega = 4[Z - F(q)]^2 m^2 e^4/\hbar^4 q^4. \tag{49}$$

$F(q)$ は電子密度の**形状因子**と呼ばれる．その一般的な挙動は $\rho(r)$ の挙動から容易に導き出される．特に

$$F(0) = Z$$

が成り立つ．原子の半径，すなわち核から電子までの平均距離を a とすれば，因子 F は事実上 $q \lesssim 1/a$ の範囲でだけ 0 と異なる値をとる．

たとえば，電子密度が関数

$$\rho(r) = Z\mathrm{e}^{-r/a}/2a^3$$

で表わされているとき，形状因子は

$$F(q) = Z[1 + q^2a^2]^{-2}.$$

$qa \gg 1$，すなわち大きな散乱角

$$\sin\frac{1}{2}\theta \gg \frac{1}{2ka}$$

に対しては，形状因子は事実上0となり（$F(q) \ll Z$），公式（49）は事実上，ただ一つの核による散乱の断面積を与えるラザフォードの公式に帰着する．すなわち電子の効果は無視されるのである．

これに反して，$qa \lesssim 1$ となると，この効果は敏感に現われる．すなわち遮蔽作用は小さな角

$$\sin\frac{1}{2}\theta \lesssim \frac{1}{2ka} \tag{50}$$

の範囲で敏感に現われる．このことは，小さい偏向が大きな衝突パラメータに対応するという古典論のイメージに合う．

最後に，ボルン近似が成り立つための条件を調べよう．

ポテンシャルの有効距離は a 程度である．トーマス＝フェルミ模型に基づく評価によれば，

$$a \simeq Z^{-1/3}\hbar^2/me^2$$

が得られる．ポテンシャルの平均値としては，核によるクーロン相互作用の点 $r=a$ における値

$$V_0 \simeq Ze^2/a$$

をとることができる．以下では，なじみ深い記号

$$v = \hbar k/m, \qquad \gamma = Ze^2/\hbar v$$

を使う．これによれば

$$ka = Z^{2/3}\gamma^{-1}.$$

ところで，判定条件（41）は $Z^{2/3} \ll 1$ となるから，これはけっして成り立たない．それゆえ，ボルン近似が成り立つのは十分高いエネルギーのときだけである．高エネルギー（$ka \gg 1$）の領域において，言いかえれば $\gamma \ll Z^{2/3}$ に対して，判定条件（43）は $\gamma \ll 1$ となる．

結論として，ボルン近似が成り立つのは，エネルギーが十分高く

$$\gamma \ll 1$$

が成り立つときに限る．この場合，遮蔽作用が敏感に現われるのはごく小さい角に対してだけであって，不等式（50）すなわち

$$\theta \lesssim \gamma$$

によって定められる領域の外部では実際上無視できるようになる．十分高いエネルギーにおいて，小さい角に対する方向分布の精密な測定を行ない，公式（49）を使ってこの実験結果を解釈すれば，形状因子を実験的に決定しうることがわかる．

§9. 中心力ポテンシャルの場合．位相のずれの計算

ポテンシャルが中心力によるときには，振幅 $T_{a\to b}$ は散乱角 $\theta(\cos\theta=(\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{k}_b)/k^2)$ だけによって決まり，つぎの展開によって表わされる：

$$T_{a\to b}=16\pi^2\sum_{lm}T_l\,Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}}_b)\,Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}_a)=4\pi\sum_l(2l+1)\,T_l P_l(\cos\theta). \tag{51}$$

この展開と第10章の展開 (31) をくらべると，係数 T_l と位相のずれとが容易に結びつけられる．すなわち

$$T_l=-\frac{\hbar^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l}{2mk}. \tag{52}$$

他方，積分 $\langle\varphi_b|V|\psi_a^{(+)}\rangle$ のなかの波 φ_b と $\psi_a^{(+)}$ のところに球面調和関数によるそれらの級数展開を代入して，展開 (51) を直接につくることもできる．角に関する積分は，球面調和関数の直交規格化関係を使えば容易に行なわれ，係数 T_l はこのとき動径に関する積分の形で現われる．

$$\psi_a^{(+)}=4\pi\sum_{lm}\mathrm{i}^l\psi_l(r)\,Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}_a)\,Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{53}$$

と置けば，

$$T_l=\int_0^\infty j_l(kr)\,V(r)\,\psi_l(r)\,r^2\,\mathrm{d}r \tag{54}$$

が得られる．

容易にわかるように（問題4），

$$\psi_l\underset{r\to\infty}{\sim}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin(kr-l\pi/2+\delta_l)}{kr}.$$

関係 (52) と (54) をくらべると，第10章§17で述べた $\sin\delta_l$ の積分表示（第10章 (73)）が容易に導き出される．これはまた，波 l が自由波に十分近い極限において，位相のずれに対するボルンの公式（第10章 (75)）に帰着する．

散乱の積分方程式から，ψ_l に対する積分方程式が同じようにして導き出される．そのためには，グリーン関数の展開

$$\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=4\pi k\sum_{lm}j_l(kr_<)\,h_l^{(+)}(kr_>)\,Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}')\,Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{55}$$

を利用するとつごうがよい（問題4）．この公式において，$r_<$ と $r_>$ はそれぞれ長さ r および r' のうち小さい方と大きい方を表わす．展開 (53)，(55) および平面波の展開を散乱の積分方程式に代入すれば，出てゆく部分波の積分方程式

$$\psi_l(r)=j_l(kr)-(2mk/\hbar^2)\int_0^\infty j_l(kr_<)\,h_l^{(+)}(kr_>)\,V(r')\,\psi_l(r')\,r'^2\,\mathrm{d}r' \tag{56}$$

が得られる．この方程式を反復すれば，収束の問題は別にして，解 ψ_l が V のべき級数

展開の形で得られる．

§10. 演算子とみなしたときのグリーン関数．H_0 のレゾルベントとの関係

上に述べた関係式のなかでは，いつもグリーン関数が積分方程式の核として入ってくる．これはまた，

$$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\equiv\langle\boldsymbol{r}|G_0^{(+)}|\boldsymbol{r}'\rangle \tag{57}$$

という関係によって定義される一つの演算子 $G_0^{(+)}$ を表わす行列と考えることもできる．たとえば，一つのベクトル $|u\rangle$ を考え，これに対応する波動関数を $u(\boldsymbol{r})$ で表わす．すなわち $u(\boldsymbol{r})\equiv\langle\boldsymbol{r}|u\rangle$ とする．演算子 $G_0^{(+)}$ の作用によってこれから導かれるベクトル $G_0^{(+)}|u\rangle$ は関数

$$\langle\boldsymbol{r}|G_0^{(+)}|u\rangle=\int\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')u(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{58}$$

によって表わされる．同じように，演算子 $G_0^{(-)}$ を

$$\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\equiv\langle\boldsymbol{r}|G_0^{(-)}|\boldsymbol{r}'\rangle \tag{59}$$

によって定義する．$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ は $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ に関して対称であるから，

$$G_0^{(-)}=G_0^{(+)\dagger}. \tag{60}$$

添字 0 を付けることによって，これらの演算子が自由波 H_0 のハミルトニアンに結びついていることを示す．添字（＋）と（－）はそれぞれの漸近的性質を表わす．実際，グリーン関数の漸近式（式 (34)）から，

$$\langle\boldsymbol{r}|G_0^{(\pm)}|u\rangle\underset{r\to\infty}{\sim}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr}}{r}\int\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}u(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\qquad(\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r) \tag{61}$$

が導かれ，これはノルム有限な任意のベクトル $|u\rangle$ に対して成り立つ（この〔ノルム有限という〕条件によって，右辺の積分の収束することが保証される）(*)．

今後これらの演算子の最後の特異点に注意する．長さ k の波数ベクトルに関する $u(\boldsymbol{r})$ のフーリエ成分がすべて 0 にならない限り，無限遠における $\langle\boldsymbol{r}|G_0^{(\pm)}|u\rangle$ の減少はあまりに遅く，この関数は二乗積分可能にならない．言いかえれば，ヒルベルト空間のベクトルに $G_0^{(+)}$ または $G_0^{(-)}$ が作用するとき，一般にはこの空間の外にあるベクトルが得られる．それゆえ，演算子 $G_0^{(+)}$ と $G_0^{(-)}$ は本来の意味でヒルベルト空間の演算子であるとは言えない．

それにもかかわらず，これらはつぎのようにヒルベルト空間の演算子の極限として定められる：

$$G_0^{(\pm)}=\lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E-H_0\pm\mathrm{i}\varepsilon}\qquad(\varepsilon>0). \tag{62}$$

(*)［訳注］これは疑問である．

この右辺に再びレゾルベント $(z-H_0)^{-1}$ が見いだされる（第16章，第 III 節を参照）．H_0 の固有値すなわち実軸の正の部分に属する点を除けば，複素変数 z の任意の値に対して，このレゾルベントはヒルベルト空間の（有界な）演算子を表わす．性質 (62) によって，特異点から成る半直線の近くにおけるレゾルベントの挙動が与えられる．この挙動はどちらの側にあるかによって変わる．z が実軸より上 $(\mathrm{Im}\, z>0)$ の値をとりながら E に近づくとき，$(z-H_0)^{-1}$ は $G_0^{(+)}$ に近づき，z が実軸より下 $(\mathrm{Im}\, z<0)$ の値をとりながら E に近づくとき，$(z-H_0)^{-1}$ は $G_0^{(-)}$ に近づく．

このような極限の性質はつぎのようにして証明される．表現 $\{\boldsymbol{p}\}$ における $(z-H_0)^{-1}$ の（対角型）行列から出発して，よく知られたユニタリ変換によれば，表現 $\{\boldsymbol{r}\}$ におけるその行列

$$\langle \boldsymbol{r}|(z-H_0)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})}\left(z-\frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right)^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{k}'$$

が得られる．角に関する積分は容易に行なわれる．

$$z=\hbar^2\zeta^2/2m, \qquad \mathrm{Re}\,\zeta>0$$

によって定められる量 ζ を導入し，

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$$

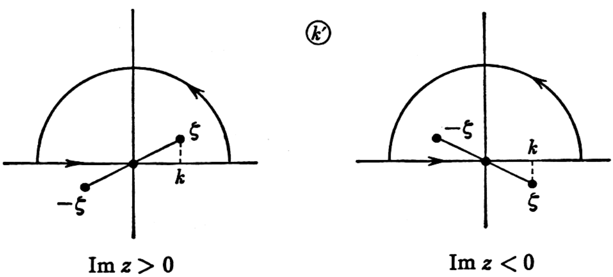
と置けば，

$$\langle \boldsymbol{r}|(z-H_0)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle = \frac{m}{\pi^2\hbar^2 R}\int_0^\infty \frac{k'\sin k'R}{\zeta^2-k'^2}\mathrm{d}k' = \frac{m}{\pi\hbar^2 R}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{k'\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'R}}{\zeta^2-k'^2}\mathrm{d}k'$$

となる．実軸より上を通り，大きな半径をもつ半円によって積分路を閉じても，最後の積分の値は変わらない．こうして得られる閉曲線上の積分は，実軸より上にある極の留数の和に $2\pi\mathrm{i}$ を掛けた値に等しい．今の場合，極は一つしかなく，その位置は $\mathrm{Im}\,\zeta$ の符号，したがって $\mathrm{Im}\, z$ の符号によって変わる（19·2図）．すなわち，

a) $\mathrm{Im}\, z>0$ のとき，極は $k'=\zeta$ で留数は $-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\zeta R}/2$；

b) $\mathrm{Im}\, z<0$ のとき，極は $k'=-\zeta$ で留数は $-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\zeta R}/2$.



19·2図

したがって，

$$\langle \boldsymbol{r}|(z-H_0)^{-1}|\boldsymbol{r}'\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\times\begin{cases} e^{i\zeta R}/R & (\mathrm{Im}\, z>0\ \text{のとき}) \\ e^{-i\zeta R}/R & (\mathrm{Im}\, z<0\ \text{のとき}). \end{cases}$$

この式と，$\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ を表わす式 (30) とを比較する．z が E に近づく極限において，ζ は k に近づき，いま計算した行列要素は $\mathcal{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ または $\mathcal{G}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ に近づく．どちらに近づくかは，極限移行の過程で z の虚部が正の値をとりつづけるか，負の値をとりつづけるかによって決まる．　　　　(証明終)

演算子に関する代数的演算の方がそれを表わす行列の演算よりも簡単であるということがしばしば起こる．それゆえ，本来のグリーン関数よりもむしろ演算子 $G_0^{(+)}$ と $G_0^{(-)}$ を用いる方が多くの場合に有益である．しかしながら，これらは特異な演算子であるから，その処理に当たっては，ある種の慎重さとある種の勘が必要とされる [10]．厳密には，上記の演算子を正則な演算子 $(E-H_0\pm i\varepsilon)^{-1}$ に置き換え，極限移行 $\varepsilon\to 0$ に対する条件を注意深く調べる必要がある．これらの厳密な論点は今後一貫して無視することにしよう．また場合によっては，演算子 $G_0^{(\pm)}$ を演算子 $(E-H_0\pm i\varepsilon)^{-1}$ に置き換える．この際，ε は正の実の量であり，これを含む公式はつねに $\varepsilon\to +0$ となる極限において考えるという規約を定めておく．

上の記号によれば，積分方程式 (36) と (37) は

$$\psi_a^{(\pm)} = \varphi_a + G_0^{(\pm)} V\psi_a^{(\pm)}, \tag{63}$$

あるいはまた，

$$\psi_a^{(\pm)} = \varphi_a + \frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon} V\psi_a^{(\pm)} \tag{63'}$$

と書かれる．

これらを反復して，ボルン展開

---

(10) 配慮することはいろいろあるが，そのなかでも，$G_0^{(\pm)}$ をノルム有限なベクトル以外には作用させない方がよい．これらの演算子の特異な性格を忘れたときに陥る失敗の形は，つぎの例によって明らかである．関係 (31) から，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ に関するグリーン関数の対称性を使って，

$$(E-H_0)G_0^{(\pm)} = 1, \qquad G_0^{(\pm)}(E-H_0) = 1$$

が導かれる．

これらの関係式の意味は，ノルム有限なベクトルに左辺を作用させるともとのベクトルが得られるということであり，それ以上のことではない．しかしながら，これらの式を文字どおりに解すれば，$E-H_0$ が逆をもつと結論しそうであり，これは明らかに誤りである．また，$G_0^{(+)}$ と $G_0^{(-)}$ は両方とも $E-H_0$ の逆であるから互いに等しいと結論しそうであるが，これも同じように誤りである．

$$\psi_a^{(\pm)} = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (G_0^{(\pm)} V)^n\right] \varphi_a \tag{64}$$

が得られる．この式のなかで，記号 ψ および φ が表わすものは定常波であってもよいし，それらによって表現されるケットベクトルであってもよい（記号 $|\ \rangle$ を省いても混乱はまったく起こりえない）．

これらの方程式の両辺にあるケットを，それぞれに共役なブラに置き換えることによって，共役な方程式が導き出される．H_0 はエルミートであるから，

$$G_0^{(+)\dagger} = G_0^{(-)}, \qquad G_0^{(-)\dagger} = G_0^{(+)} \tag{65}$$

である．方程式 (63) からは，

$$\langle \psi_a^{(\pm)} | = \langle \varphi_a | + \langle \psi_a^{(\pm)} | V G_0^{(\mp)}, \tag{66}$$

(64) からは，ボルン展開

$$\langle \psi_a^{(\pm)} | = \langle \varphi_a | \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (V G_0^{(\mp)})^n\right] \tag{67}$$

が導かれる．

II．ひずみ波への一般化

§11.　一般化されたボルン近似

ボルン近似を利用するには位置エネルギー $V(\boldsymbol{r})$ が大きすぎるけれども，V に近い一つのポテンシャルに対しては散乱問題を厳密に解くことができる，という場合がありうる．このようなときには，差を摂動として取り扱うのがよい．これは第I節の取り扱いを簡単に一般化することによって行なわれる．

$$V(\boldsymbol{r}) = U_1(\boldsymbol{r}) + W_1(\boldsymbol{r}), \qquad H_1 = H_0 + U_1(\boldsymbol{r}) \tag{68}$$

と置けば，

$$H = H_1 + W_1 \tag{69}$$

となり，H_1 は摂動のないハミルトニアン，W_1 は摂動である．U_1 と V は漸近的に $1/r$ より速く 0 に近づくと仮定する．$1/r$ 程度のポテンシャルに対する一般化は §15 で与えられる．H_1 の定常状態は厳密に知られているとする．これらを文字 χ で表わし，対応する振幅を文字 g で表わす．その他については §2 の記号をそのまま使う．たとえば $\chi_a^{(+)}$ と $g_a^{(+)}$ は

$$H_1 \chi_a^{(+)} = E \chi_a^{(+)}, \qquad \chi_a^{(+)} \underset{r\to\infty}{\sim} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}} + g_a^{(+)}(\Omega)\,\mathrm{e}^{ikr}/r$$

によって定められる．

ハミルトニアン H に関して，第I節に述べたすべての性質は明らかに H_1 にも当ては

まる．われわれは，H_1 によって支配されるエネルギー E の衝突に対して遷移行列を定めることができる．すなわちこれを $T^{(1)}$ で表わせば，

$$T^{(1)}_{a\to b} \equiv \langle \varphi_b | T^{(1)} | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | U_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = \langle \chi_b^{(-)} | U_1 | \varphi_a \rangle. \tag{70}$$

§2で証明された諸性質のうち，特に

$$g_b^{(-)*}(-\Omega_a) = g_a^{(+)}(\Omega_b) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} T^{(1)}_{a\to b}$$

を思い出そう．

性質 (9) から，差 $T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}$ の積分表示が導かれる．実際，

$$\hat{U} = U_1, \qquad U = V$$

と置けば，つぎの式が順に得られる：

$$\begin{aligned}\langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \psi_a^{(+)} \rangle &= -\frac{2\pi\hbar^2}{m}[f_a^{(+)}(\Omega_b) - g_b^{(-)*}(-\Omega_a)] \\ &= -\frac{2\pi\hbar^2}{m}[f_a^{(+)}(\Omega_b) - g_a^{(+)}(\Omega_b)] = T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b}.\end{aligned} \tag{71}$$

$\hat{U} = V$, $U = U_1$ と置けば，同じようにして

$$\langle \psi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = T_{a\to b} - T^{(1)}_{a\to b} \tag{72}$$

が得られる．ついでながら関係

$$\langle \psi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle = \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \psi_a^{(+)} \rangle \tag{73}$$

に注意しておく．これは性質 (71) と (72) から得られる自明の結果であり，関係 (18) の一般化である．

これら二つの積分表示のどちらをとっても，摂動による処理の出発点として利用できる．考え方を決めるために関係 (71) をとろう．これから

$$\boxed{T_{a\to b} = T^{(1)}_{a\to b} + \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \psi_a^{(+)} \rangle} \tag{74}$$

が得られる．遷移振幅を表わすこの式は厳密に正しい．第1項は W_1 を0としたときの振幅を表わし，第2項は W_1 があるための補正である．W_1 が十分小さいときには，正確な定常波 $\psi_a^{(+)}$ は $\chi_a^{(+)}$ とすこししか違わないから，補正項のなかで前者を後者に置き換えても大きな誤差は生じない．こうして，摂動 W_1 に関する第1次の遷移振幅

$$T_{a\to b} \simeq T^{(1)}_{a\to b} + \langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle \tag{75}$$

が得られる．これはボルン近似の一般化である ((23) を参照)．補正項の積分

$$\langle \chi_b^{(-)} | W_1 | \chi_a^{(+)} \rangle \equiv \int \chi_b^{(-)*}(\boldsymbol{r}) W_1(\boldsymbol{r}) \chi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{76}$$

のなかに，出てゆく波と入ってくる波に対する定常解が同時に現われること，またそれぞれの位置に十分注意する．

$U_1=0$ と置けば，ボルンの結果がもう一度得られる．$U_1\neq 0$ となる一般の場合にこの積分を計算することは，明らかにボルンの公式の計算ほど簡単ではない．しかし U_1 と V が球対称性をもつときには，事柄が多少簡単になる．この場合には展開（問題4）

$$\chi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}=\frac{4\pi}{kr}\sum_{lm}\mathrm{i}^l\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\eta_l}F_l(k\,;\,r)\,Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})\,Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{77}$$

を利用することができる．ここで $F_l(k\,;\,r)$ は動径方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2m}{\hbar^2}U_1+k^2\right]y=0 \tag{78}$$

の正則解を表わし，その漸近的挙動は

$$F_l(k\,;\,r)\underset{r\to\infty}{\sim}\sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\eta_l\right) \tag{79}$$

であって，η_l はポテンシャル U_1 のなかの l 波の位相のずれである．$\chi_a^{(+)}$ と $\chi_b^{(-)}$ の展開を積分（76）に代入し，角についての積分をすれば，

$$\langle\chi_b^{(-)}|W_1|\chi_a^{(+)}\rangle=\frac{4\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)P_l(\cos\theta)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\eta_l}\int_0^\infty F_l^2(k\,;\,r)W_1(r)\mathrm{d}r$$

が得られる．W_1 の作用半径が短いほどこの展開は速く収束する．

§12.　ボルン展開の一般化

さらに高次の補正を定めるためには，W_1 のべきによる $\psi_a^{(+)}$ の展開をつくる必要がある．そのために，第I節と似た方法により，$\psi_a^{(+)}$ をある適当な積分方程式の解として書き表わす．求める展開はこの方程式を反復することによって得られる．

エネルギー $E=\hbar^2k^2/2m$ に対応するハミルトニアン H_1 のグリーン関数で，出てゆく波の漸近的挙動を示すものを $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ で表わす．定義によれば，この関数は $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ に関して対称であり，偏微分方程式

$$(E-H_1)G_1^{(+)}\equiv\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle+k^2)-U_1\right]G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}) \tag{80}$$

を満たし，$\boldsymbol{r}'$ を固定して $r\to\infty$ とするとき，漸近的には $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r$ のように振舞う．これはある演算子 $G_1^{(+)}$ の表現行列とみなされる．その定義式は

$$\langle\boldsymbol{r}|G_1^{(+)}|\boldsymbol{r}'\rangle\equiv G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}').$$

差し当たっては，上にあげた諸性質をもつ関数 $G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ がつねにただ一つだけ存在することを議論せずに認めておく．

積分方程式を得るためには，この関数を自由波のグリーン関数の代りに使って，§5の議論を繰り返す．われわれは $\psi_a^{(+)}$ のシュレーディンガー方程式を

$$(E-H_1)\psi_a^{(+)} \equiv \left[\frac{\hbar^2}{2m}(\triangle+k^2)-U_1\right]\psi_a^{(+)} = W_1\psi_a^{(+)}$$

の形に書き表わし，方程式 (80) により，関数

$$\psi_a^{(+)} - \int G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')W_1(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

が《同次方程式》

$$(E-H_1)\chi = 0$$

を満たすことに注意する．この関数は $\chi_a^{(+)}$ と同じ漸近式をもつから，両者は必ず等しい．それゆえ，$\psi_a^{(+)}$ は積分方程式

$$\psi_a^{(+)} = \chi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}) + \int G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')W_1(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{81}$$

の解である．

W_1 のべきによる $\psi_a^{(+)}$ の展開はこれから容易に導き出される．この展開式を (74) の右辺の《行列要素》に代入すれば，W_1 のべきによる振幅 $T_{a\to b}$ の展開が得られる．最初の 2 項だけ残せば，近似公式 (75) がもう一度見いだされる．

$G_1^{(+)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ の複素共役もまたエネルギー E に対する H_1 のグリーン関数である．すなわち，入ってくる波の漸近的挙動によって特徴づけられるグリーン関数 $G_1^{(-)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ である．この関数の性質から，前と同じような議論を使って積分方程式

$$\psi_a^{(-)} = \chi_a^{(-)} + \int G_1^{(-)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')W_1(\boldsymbol{r}')\psi_a^{(-)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{82}$$

が導き出される．この方程式から出発しても，W_1 のべきによる $T_{a\to b}$ の展開が確かに得られる．このときには性質 (73) を利用するが，得られる結果は明らかに同じである．

§13. ひずみ波のグリーン関数

グリーン関数 $G_1^{(+)}$ と $G_1^{(-)}$ の存在を証明することが残されている．われわれは等式 (62) をそのまま一般化して，これらが H_1 のレゾルベントの極限として定められること，すなわち

$$G_1^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E-H_1\pm \mathrm{i}\varepsilon} \tag{83}$$

を示そう．同様に，E の一つ一つの値に対してハミルトニアン H には関数

$$G^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E-H\pm \mathrm{i}\varepsilon} \tag{84}$$

が結びつけられる．

具体的に考えるため，演算子 $G^{(+)}$ と $G^{(-)}$ をとろう．そしてまず

$$(E-H)G^{(\pm)}=1, \qquad G^{(\pm)}(E-H)=1 \tag{85}$$

を示す．$|u\rangle$ がノルム有限なベクトルであるとき，明らかに

$$(E-H)\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}|u\rangle=|u\rangle-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}|u\rangle \tag{86}$$

が成り立つ．右辺の第2項のノルムは

$$N(\varepsilon)=\varepsilon^2\langle u|\frac{1}{(E-H)^2+\varepsilon^2}|u\rangle=\varepsilon\int|u(E')|^2\frac{\varepsilon}{(E-E')^2+\varepsilon^2}\mathrm{d}E'$$

である．最後の式を得るには，H を対角型にする表現を採用すればよい．$|u(E')|^2\mathrm{d}E$ はエネルギー E' に対する $|u\rangle$ の成分のノルムである．δ 関数のよく知られた性質（付録 A (15c)）により，$\varepsilon\to 0$ のときこの積分は $\pi|u(E)|^2$ に近づく．それゆえこの極限においてノルム $N(\varepsilon)$ は 0 になる．したがって $\varepsilon\to 0$ のとき (86) は

$$(E-H)G^{(+)}|u\rangle=|u\rangle$$

となる．この関係は（ノルム有限な [11]）任意の $|u\rangle$ に対して成り立つから，

$$(E-H)G^{(+)}=1$$

が得られる．(85) に含まれる他の三つの関係も同じ筋道によって証明される．

同様に，

$$(E-H_1)G_1^{(\pm)}=1, \qquad G_1^{(\pm)}(E-H_1)=1 \tag{87}$$

が成り立つ．(85) と (87) により，$G^{(\pm)}$ と $G_1^{(\pm)}$ がそれぞれエネルギー E に対する H と H_1 のグリーン関数であることが保証される．表現 $\{r\}$ に関して書き直せば，これらは確かにグリーン関数を特徴づける偏微分方程式を与える．たとえば，(87) の最初の式から (80) が得られる．

上記の証明では，極限移行 $\varepsilon\to+0$ の状態を注意深く調べた．ここではそれが本質的な役割を演じるからである．今後はこれらの厳密な論点に立ち入らず，125 頁の規約にしたがい，場合に応じて $G^{(\pm)}$ を $[E-H\pm\mathrm{i}\varepsilon]^{-1}$ に，$G_1^{(\pm)}$ を $[E-H_1\pm\mathrm{i}\varepsilon]^{-1}$ に置き換え，これらの式のなかの ε は無限に小さい正の実の量であるとしよう．

第 16 章 §16 の初めに述べた操作を繰り返せば，基本的な等式

$$\frac{1}{E-H\pm\mathrm{i}\varepsilon}-\frac{1}{E-H_0\pm\mathrm{i}\varepsilon}=\frac{1}{E-H\pm\mathrm{i}\varepsilon}V\frac{1}{E-H_0\pm\mathrm{i}\varepsilon} \tag{88a}$$

$$=\frac{1}{E-H_0\pm\mathrm{i}\varepsilon}V\frac{1}{E-H\pm\mathrm{i}\varepsilon} \tag{88b}$$

を得る．H, V をそれぞれ H_1, U_1 に変えた式と H_0, V をそれぞれ H_1, W_1 に変えた式も同様に成り立つ．

---

(11) 脚注 (10) の注意はここでもそのまま当てはまる．

(88) から導かれるいろいろな結果のうちに，つぎの関係がある ([12])：

$$(1+G^{(\pm)}V)(1-G_0^{(\pm)}V)=1 \tag{89a}$$

$$(1-G_0^{(\pm)}V)(1+G^{(\pm)}V)=1. \tag{89b}$$

ところで，方程式 (63) は

$$[1-G_0^{(\pm)}V]\psi_a^{(\pm)}=\varphi_a$$

という形に書き表わされる．この式の両辺に演算子 $(1+G^{(\pm)}V)$ を作用させ，関係 (89a) を使って左辺を簡単にすれば，重要な公式

$$\psi_a^{(\pm)}=\left(1+\frac{1}{E-H\pm\mathrm{i}\varepsilon}V\right)\varphi_a \tag{90}$$

が得られる．H はエルミートであるから，明らかに

$$G^{(\pm)\dagger}=G^{(\mp)}. \tag{91}$$

したがって (90) に共役な等式は

$$\langle\psi_a^{(\pm)}|=\langle\varphi_a|\left(1+V\frac{1}{E-H\mp\mathrm{i}\varepsilon}\right) \tag{92}$$

と書かれる．

われわれはいま，$G^{(+)}$ と $G^{(-)}$ の漸近的性質をそれぞれ $G_0^{(+)}$ と $G_0^{(-)}$ の漸近的性質から導き出すところまできた．$|u\rangle$ が無限遠において十分速く減少するベクトルであるとき，(88b) からつぎの式が得られる：

$$G^{(\pm)}|u\rangle=G_0^{(\pm)}|\mathcal{V}\rangle,$$

ただし

$$|\mathcal{V}\rangle=(1+VG^{(\pm)})|u\rangle.$$

ベクトル $|\mathcal{V}\rangle$ もまた無限遠で十分速く減少する ([13]) から，これに (61) を適用することができ，その結果は

$$\langle\boldsymbol{r}|G^{(\pm)}|u\rangle\underset{r\to\infty}{\sim}-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr}}{r}\langle\varphi_{\pm\boldsymbol{k}}|\mathcal{V}\rangle\qquad(\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r) \tag{93}$$

となる．それゆえ，ヒルベルト空間のベクトルに $G^{(+)}$ を作用させると，一般には純粋に出てゆく波の漸近的挙動を示すベクトルが得られ，$G^{(-)}$ を作用させると，純粋に入ってくる波のように振舞うベクトルになる．(93) の右辺の $|\mathcal{V}\rangle$ をその定義式に置き換え，

$$\langle\varphi_{\pm\boldsymbol{k}}|(1+VG^{(\pm)})=\langle\psi_{\pm\boldsymbol{k}}^{(\mp)}|$$

に注意すれば（式 (92)），

([12]) これらの等式から，$[1+G^{(\pm)}V]$ と $[1-G_0^{(\pm)}V]$ が互いに逆であることはもちろん，これらがそれぞれ逆をもつという結論も出てこない．脚注 ([10]) を参照．

([13]) これ以後の議論は，V が無限遠において $1/r$ のような挙動を示すときには成り立たない．

$$\langle \boldsymbol{r}|G^{(\pm)}|u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\pm ikr}}{r}\langle \psi^{(\mp)}_{\pm\boldsymbol{k}}|u\rangle \tag{94}$$

が得られる．$G^{(+)}$ の漸近的性質に入ってくるのは波 $\psi^{(-)}_{\boldsymbol{k}}$ であり，$G^{(-)}$ に入ってくるのは波 $\psi^{(+)}_{-\boldsymbol{k}}$ であることに十分注意する．

$G^{(+)}_1$ と $G^{(-)}_1$ に対しても同様な性質が見いだされる．特に漸近的性質として，

$$\langle \boldsymbol{r}|G^{(\pm)}_1|u\rangle \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\pm ikr}}{r}\langle \chi^{(\mp)}_{\pm\boldsymbol{k}}|u\rangle \qquad (\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r) \tag{95}$$

を得る．

U_1 が球対称性をもつときには，動径方程式 (78) の解を使って，グリーン関数 $G^{(\pm)}_1$ が容易につくられる．結果は（問題 4）

$$\langle \boldsymbol{r}|G^{(\pm)}_1|\boldsymbol{r}'\rangle = -\frac{2m}{\hbar^2 k}\frac{1}{rr'}\sum_{lm}\mathrm{e}^{\pm i\eta_l}F_l(k\,;\,r_<)u^{(\pm)}_l(k\,;\,r_>)Y^{m*}_l(\hat{\boldsymbol{r}}')Y^m_l(\hat{\boldsymbol{r}}). \tag{96}$$

この公式のなかで，$r_<$ と $r_>$ はそれぞれ長さ r と r' のうちの小さい方と大きい方を表わし，η_l と F_l は §11 で定義された量である．また $u^{(\pm)}_l$ は方程式 (78) の非正則解であって，漸近的挙動

$$u^{(\pm)}_l \underset{r\to\infty}{\sim} \mathrm{e}^{\pm i(kr-l\pi/2)}$$

を示すものである．$G^{(+)}_1$ と $G^{(-)}_1$ を特徴づける性質は，これらを具体的に表わす式 (96) から容易に確かめられる．

§14. いろいろな応用．T の定義と形式的な性質

§13 で得たグリーン関数の形式的性質を利用すれば，さきに示された諸結果の大部分は簡単な代数的処理によってもう一度得られる．この形の処理から生じる利点は，一方においてそれが形式的にきわめて簡明であること，他方においてそれがたやすく一般化に役立つということに基づく．

特に積分方程式 (81) と (82) がもう一度得られ，

$$\psi^{(\pm)}_a = \chi^{(\pm)}_a + \frac{1}{E-H_1\pm i\varepsilon}W_1\psi^{(\pm)}_a \tag{97}$$

という形に書き表わされる．この両辺の漸近的性質をくらべることにより，これから関係 (74) が導かれる．

また，証明は読者に任せることにするが，公式

$$\chi^{(\pm)}_a = \left[1+\frac{1}{E-H_1\pm i\varepsilon}U_1\right]\varphi_a \tag{98}$$

$$\psi^{(\pm)}_a = \left[1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}W_1\right]\chi^{(\pm)}_a \tag{99}$$

をあげておく.

さらに，T の形式的な定義を与えることもできる．関係 (20) は，はっきり決まったエネルギー E をもつ平面波のあいだの行列要素を与えているにすぎない．しかし公式 (90) を考えに入れると，この関係は

$$\langle\varphi_b|T|\varphi_a\rangle=\langle\varphi_b|\left[V+V\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V\right]|\varphi_a\rangle \tag{100}$$

という形に書き表わされる．この関係を一般化して，

$$T=V+V\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V \tag{101}$$

と置く．この定義において，E は単なるパラメータの役割を演じる．複素変数 z の関数

$$T(z)=V+V\frac{1}{z-H}V$$

を考えれば，z が実軸より上 ($\mathrm{Im}\,z>0$) の値をとりながら実数値 E に近づく極限において $T(z)$ のとる値が T である.

等式 (88a) と (88b) を使って (101) の右辺を変形すれば，演算子 T に対する積分方程式

$$T=V+T\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}V \tag{102a}$$

$$T=V+V\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}T \tag{102b}$$

が容易に得られる.

実際には，たいていの場合 T はエネルギー E をもつ自由波のあいだの行列要素，特にエネルギー E をもつ平面波のあいだの行列要素としてしか現われない.

実例によって説明するため，T の形式的な性質だけを利用し，微視的可逆性の関係 (21) がどのようにして導き出されるかを示そう．時間反転の（反線形）演算子を K で表わす．明らかに H_0 は時間反転によって不変である．また，当然

$$\varphi_{Ka}=K\varphi_a,\qquad \varphi_{Kb}=K\varphi_b \tag{103}$$

である．H もまたこの不変性

$$KHK^\dagger=H$$

をもつとする．このことは

$$KVK^\dagger=V$$

を意味する．定義 (84) と (101) を思い出せば，これから順に

$$KG^{(+)}K^\dagger=G^{(-)}=G^{(+)\dagger}$$

および

$$KTK^{\dagger} = T^{\dagger} \qquad (104)$$

が導き出される．これは時間反転に対する T の変換の規則であるが，その結果として

$$T_{Kb \to Ka} = (\langle \varphi_a | K^{\dagger}) T(K|\varphi_b\rangle) = \langle \varphi_a | (K^{\dagger} T K) | \varphi_b \rangle^*$$
$$= \langle \varphi_b | (K^{\dagger} T^{\dagger} K) | \varphi_a \rangle = \langle \varphi_b | T | \varphi_a \rangle = T_{a \to b}$$

が得られる．

これは微視的可逆性の関係である．

§15. $1/r$ のポテンシャルに関する注意

この研究を通じて，われわれはポテンシャル $V(r)$，$U_1(r)$，$W_1(r)$ が無限遠で $1/r$ より速く減少することを仮定してきた．このことは，いままでに使ったいろいろな波やいろいろなグリーン関数が指定された通りの漸近的挙動を示すために避けられない条件である．しかしいくらかの修正を施すことによって，$V(r)$ が $1/r$ の項を含む場合にも，$U_1(r)$ がその $1/r$ の項を含み，したがって $W_1(r)$ が $1/r$ より速く 0 に近づくことを条件として，やはりこの研究を適用することができる．漸近式が変わるのは，指数関数の変数のなかに $\log 2kr$ に比例する付加項が現われるという点だけである．u_l と F_l の漸近式のなかの変数にも同じ修正を施す必要がある．これらいくつかの違いを除けば，方法も結果も本質的に同じである．特に，グリーン関数の定義 (83) と (84) はそのまま有効である．積分方程式 (97) はそのまま成り立ち，基本性質 (74) も同様である．また，W_1 が小さな摂動とみなされる極限において公式 (75) も成り立つ．

III. 複雑な衝突とボルン近似

§16. 一般論．断面積

この節では [14]，任意の粒子間の衝突に関して前2節の考察を拡張する．今後取り扱う粒子は，この言葉の一般的な意味に解して，場合によって内部構造が与えられているとする．電子，陽子，中性子のような素粒子に関しては，内部変数はスピン変数だけになる．しかしわれわれはいくつかの素粒子の結合によってつくられる複雑な粒子，すなわちイオン，原子，原子核なども同時に取り扱う．

---

[14] この節で導入される術語に関して，さらに詳しくは，C. Bloch, *Cours sur la Théorie des Réactions Nucléaires*, 第I，II，III章，C. E. N. Saclay (1955—1956) を参照．また J. Blatt と V. Weisskopf, *Theoretical Nuclear Physics*, 第VIII章，J. Wiley, New York, 1952 を見よ．

さて，複雑なものでもそうでないものでもよいが，二つの粒子 A と X が衝突に入るとする．このとき一般にはつぎの3種の効果が観察されうる：

a) 2粒子は単に進路の方向を変えるだけで，それぞれの内部量子状態を変えない．すなわち

$$A+X \to A+X.$$

これが**弾性散乱**である．

b) 2粒子は屈折するとともに内部量子状態を変える [15]．たとえば，それぞれ状態 A'，X' をとって現われる．すなわち

$$A+X \to A'+X'.$$

これが**非弾性散乱**である．

c) 粒子 A と X の衝突の過程で，それらを構成する素粒子がいくつか交換される．あるいはもっと一般に，系 $(A+X)$ が二つまたはそれ以上の異なる粒子に分かれる．たとえば，A，X と異なる粒子 B，Y が衝突によって現われる．すなわち

$$A+X \to B+Y.$$

これが**転換衝突**（あるいは本来の意味の**反応**）である (*)．

化学反応は分子のあいだの転換衝突であって，核反応は原子核のあいだの転換衝突である．これについてはのちにいくつかの例をあげる．

2粒子の衝突を特徴づける量は断面積である．この概念はすでに第10章（§2）で弾性衝突に対して定義されている．もっと一般に，一つの衝突が与えられたとき，ある型の事象の断面積とは，標的ごとに単位時間に起こるこの型の事象の個数と，この標的に対する入射粒子の流束との比をいう．

曖昧さを残さずに A と X の衝突に関する断面積を定めるためには，衝突の初期条件，すなわち粒子 A と X の量子的状態と速度とをそれぞれ明確にしておくことが必要である．普通の実験の条件では，一方の速度，たとえば X の速度は0である．すなわち，実際上静止しているいくつかの粒子 X から成る標的に，粒子 A から成る等速のビームを当てる．しかしながら，全体の重心の運動は相対座標の運動から厳密に分離されるから，初期条件の違いが座標系の変更だけから生じたときの断面積は，簡単な運動学的考察によって互いに結びつけられる．特に，第10章 §7の方法（第10章，問題2を参照）をその

---

[15] この変化は単なるスピンの反転でもよい．ここで採用した定義は普通の定義とすこし違う．普通は，散乱に伴って粒子の内部エネルギーに変動があるかないかにより，非弾性衝突と弾性衝突とを区別する．

(*) [訳注] collision de réarrangement を“転換衝突”と訳すことにしておく．わが国では“反応”と呼ぶのがふつうである．

まま一般化して，実験室系（X の速度0）における断面積を重心系（重心の速度0）における断面積に結びつけることができる．今後取り扱う断面積はすべて重心系について考える．

以下の議論では，いつでも E は重心系における全入射エネルギーを表わし，H は相対変数の変化を支配するハミルトニアンを表わす（これに重心の運動エネルギーを加えると全ハミルトニアンが得られる）．

§17.　チャンネル

さきへ進む前に，複雑な衝突を取り扱うとき大そう役に立つ概念を一つ定義する．すなわちチャンネル（英語 channel）という概念である．衝突の過程で系に生じうる分割の様態の一つ一つをこのように言い表わす．これらの様態の一つは，二つの入射粒子を与える．これが入口のチャンネルである．弾性散乱においては，2粒子は入口のチャンネルにとどまる．他の二つの型の反応では，出口のチャンネルは入口のチャンネルと異なる．出口のチャンネルを構成する粒子が入口のチャンネルを構成する粒子と同じであるかまたは異なるかによって，この反応は非弾性衝突または転換衝突である．今後は各チャンネルを表わすのにギリシア文字を使う．

各チャンネルにはいくつかの量とデータが結びつけられる．説明を簡単にするため，反応のチャンネルは2粒子から成るチャンネルだけであると仮定しよう．

そこで二つの粒子 C と Z から構成される一つのチャンネルを γ とする．ベクトル $\boldsymbol{r}_\gamma$ によって Z に関する C の相対的な位置を定める．言いかえれば，C と Z の重心に対する位置を $\boldsymbol{r}_C$ と $\boldsymbol{r}_Z$ で表わすとき，$\boldsymbol{r}_\gamma=\boldsymbol{r}_C-\boldsymbol{r}_Z$ である．同様にして相対運動量 $\boldsymbol{p}_\gamma$ と換算質量 M_γ が定められる．すなわち

$$M_\gamma=\frac{M_C M_Z}{M_C+M_Z}$$

であり，チャンネル γ の運動エネルギーは $\boldsymbol{p}_\gamma^2/2M_\gamma$ である．

（ノルム1の）波動関数 φ_γ はこのチャンネルの粒子の内部量子状態を記述するものであるが，これは粒子 C および Z の波動関数 φ_C および φ_Z の積である．これらの粒子のハミルトニアンを h_C および h_Z とすれば，

$$h_C\varphi_C=e_C\varphi_C,\qquad h_Z\varphi_Z=e_Z\varphi_Z$$
$$\varphi_\gamma=\varphi_C\varphi_Z,\qquad e_\gamma=e_C+e_Z$$

が成り立つ．e_γ はチャンネル γ の粒子の全内部エネルギーである．

最後に，粒子 C と Z のあいだの相互作用，すなわち C の各素粒子と Z の各素粒子とのあいだの相互作用ポテンシャルの和を V_γ とする．$r_\gamma\to\infty$ となる極限において V_γ

は0に近づく．今後はつねに，これが $1/r_\gamma$ より速く減少すると仮定する．しかし§15に示した方法によれば，これを $1/r_\gamma$ 程度のポテンシャルに拡張することは容易である．

この系のハミルトニアンは

$$H = H_\gamma + V_\gamma \tag{105}$$

と書かれる．ただし

$$H_\gamma = h_C + h_Z + \boldsymbol{p}_\gamma^2/2M_\gamma. \tag{106}$$

§18. 断面積の計算．T 行列

上に取り扱った衝突では，入口のチャンネルはチャンネル $(A+X)$ である．これをチャンネル α と言い表わす．この衝突の初期条件を完全に定めるためには，初期状態における粒子の相対運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_a$ を与える必要がある．このように定めた初期条件の全体を便宜上文字または添字 a で表わすことにする．すなわち $a \equiv (\alpha, \boldsymbol{k}_a)$．このとき

$$E = e_\alpha + \hbar^2 k_a^2/2M_\alpha \tag{107}$$

が成り立つ．反応 $A+X \to B+Y$ が起こりうるとする．この場合，チャンネル $(B+Y)$ すなわちチャンネル β は開いたチャンネルであるという．このチャンネルの粒子ははっきり決まった大きさ $\hbar k_b$ の相対運動量をもって現われ，この値はエネルギー保存の法則

$$E = e_\beta + \hbar^2 k_b^2/2M_\beta \tag{108}$$

によって与えられる．チャンネル β が開いているために，$E - e_\beta$ は正であることが明らかに必要である．

初期条件の全体 a を一つ定めるごとに，一つの平面波

$$\Phi_a = \varphi_a \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_\alpha} \tag{109}$$

と二つの定常波 $\Psi_a^{(+)}$, $\Psi_a^{(-)}$ がこれに結びつけられる．$\Psi_a^{(+)}$ はエネルギー E に対応する H の定常解であって，入口のチャンネルでは $(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_\alpha} +$ 出てゆく波$)$ の漸近的挙動をとり，他の開いたチャンネルではつねに出てゆく波だけの挙動をとる．$\Psi_a^{(-)}$ は入ってくる波を使って同じように定義される．これらの定義により，

$$H_\alpha \Phi_a = E\Phi_a \tag{110}$$

$$H\Psi_a^{(\pm)} = E\Psi_a^{(\pm)} \tag{111}$$

が成り立ち，任意の開いたチャンネル γ（これは二つより多くの粒子を含まないことをつねに仮定する）に対しては，

$$\begin{aligned}\Psi_a^{(\pm)} &\underset{r_\alpha\to\infty}{\sim} \varphi_\alpha[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_\alpha} + f_{a\alpha}^{(\pm)}(\Omega_\alpha)\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}k_a r_\alpha}/r_\alpha] \\ &\underset{r_\gamma\to\infty}{\sim} \varphi_\gamma f_{a\gamma}^{(\pm)}(\Omega_\gamma)\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}k_c r_\gamma}/r_\gamma \qquad (\gamma \neq \alpha).\end{aligned} \tag{112}$$

われわれは議論を省いて，定常解 $\Psi_a^{(+)}$ と $\Psi_a^{(-)}$ の存在を認めることにする．

断面積は波 $\Psi_a^{(+)}$ の漸近的挙動に直接結びつけられる．このことは，第10章§4－6の議論をそのまま一般化することによって示される．証明をやり直すことは読者に任せ，ここではその結果を述べるだけにする．

方向 Ω_b に粒子 B が放出される断面積を $\mathrm{d}\sigma_{a\to b}/\mathrm{d}\Omega_\beta$ で表わせば，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega_\beta} = \frac{v_b}{v_a}|f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)|^2 \tag{113}$$

が成り立つ[16]．$v_a = \hbar k_a/M_\alpha$ は入射速度，$v_b = \hbar k_b/M_\beta$ は衝突によって生じた粒子 B の相対速度である．

§3の考察を一般化すれば，エネルギー E に対する衝突の現象を一つの遷移行列 T によって記述することができる．T はつぎのように定義される：

$$T_{a\to b} \equiv \langle b|T|a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta} f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b). \tag{114}$$

(113) と (114) から

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega_\beta} = \frac{2\pi}{\hbar v_a}|T_{a\to b}|^2 \rho_b(E)} \tag{115}$$

が導かれる．$\rho_b(E)$ は第17章§5の定義にしたがい，終りの状態の密度を表わす．公式 (115) は公式 (19′) の一般化であり，$T_{a\to b}$ は遷移 $a\to b$ の振幅である．

§19. 遷移振幅の積分表示

$T_{a\to b}$ の積分表示を求めるためには，まず性質 (9) を一般化するとつごうがよい．

われわれが取り扱う量子系について考えられる二つのハミルトニアンを $H, \hat{H}$ とする．これらは同じ運動エネルギーをもつが，位置エネルギーは異なっていても構わない．ただし，これらの差は漸近的に $1/r$ より速く0に近づく項から成ることを要請する．われわれは特にエネルギー E に対する H と $\hat{H}$ の定常解を考え，これらの解をそれぞれ Ψ と $\hat{\Psi}$ で表わす．あるチャンネルが，H によって支配される衝突に対して開いており，$\hat{H}$ によって支配される衝突に対して閉じているような場合，またその逆の場合もありうるということに注意する．われわれは $\hat{H}$ によって支配される衝突に対してチャンネル β が開いていると仮定しよう．その結果，初期条件 $b\equiv(\beta, \boldsymbol{k}_b)$ に対応する解 $\hat{\Psi}_b^{(-)}$ が存在する．そして

$$\hat{H}\hat{\Psi}_b^{(-)} = E\hat{\Psi}_b^{(-)} \tag{116}$$

が成り立ち，任意の開いたチャンネル δ（これは二つより多くの粒子を含まないと仮定す

---

[16] この結果はまた第10章§2の議論を一般化しても得られる．断面積は粒子 B の流束 $v_b|f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)|^2$ と入射流束 v_a の比に等しい．

る）に対し，

$$\hat{\Psi}_b^{(-)} \underset{r_\beta\to\infty}{\sim} \varphi_\beta[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{r}_\beta} + \hat{f}_{b\beta}^{(-)}(\Omega_\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_b r_\beta}/r_\beta]$$

$$\underset{r_\delta\to\infty}{\sim} \varphi_\delta \hat{f}_{b\delta}^{(-)}(\Omega_\delta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_d r_\delta}/r_\delta \qquad (\delta\neq\beta). \tag{117}$$

このときつぎのことが示される：

$$\langle\hat{\Psi}_b^{(-)}|(H-\hat{H})|\Psi_a^{(+)}\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta}f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b) + \frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha}\hat{f}_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a). \tag{118}$$

証明の筋道は性質（9）の場合と同じである．方程式（111）の両辺に $\hat{\Psi}_b^{(-)*}$ を掛け，方程式（116）の両辺の複素共役に $\Psi_a^{(+)}$ を掛けて差をとれば，

$$[\hat{\Psi}_b^{(-)*}(H\Psi_a^{(+)}) - (H\hat{\Psi}_b^{(-)})^*\Psi_a^{(+)}] + \hat{\Psi}_b^{(-)*}(H-\hat{H})\Psi_a^{(+)} = 0$$

となる．これをスピンについて加え，配置空間の全体で積分すれば，関係式（118）が得られるのである．H がエルミートであるにもかかわらず，括弧のなかは必ずしも 0 でない．関数 Ψ と $\hat{\Psi}$ はどちらもノルム有限ではないからである．これを計算するために，配置空間のなかの有限な範囲で積分を行ない，この範囲が全空間にひろがるとき積分が近づく極限を求める．グリーンの定理を適用すれば，この体積積分は面積分に変換され [17]，それはまた，Ψ と $\hat{\Psi}$ の双方に開いたいろいろなチャンネル ν に関する項の和の形に書き表わされる．すなわち

$$\langle\hat{\Psi}_b^{(-)}|(H-\hat{H})|\Psi_a^{(+)}\rangle = \sum_\nu \frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\{\hat{\Psi}_b^{(-)*}, \Psi_a^{(+)}\}_\nu \tag{119}$$

となる．記号 $\{\cdots\}_\nu$ は §2 で導入した記号を一般化したものであり，

$$\{F_1, F_2\}_\nu = \left\langle\int\left(F_1\frac{\partial F_2}{\partial r_\nu} - F_2\frac{\partial F_1}{\partial r_\nu}\right)\bigg|_{r_\nu=R_\nu} R_\nu^2\,\mathrm{d}\Omega_\nu\right\rangle$$

と定義する．記号 $\left\langle\int\cdots\mathrm{d}\Omega_\nu\right\rangle$ は相対距離 r_ν を除くすべての変数に関する和あるいは積分を意味する．（119）の右辺の各項を評価するには，Ψ と $\hat{\Psi}$ およびこれらの動径導関数のところにそれぞれの漸近式（式（112）と（117））を代入すればよい．α および β と異なる任意のチャンネル ν に対しては，$\Psi_a^{(+)}$ は純粋に出てゆく波であり，$\hat{\Psi}_b^{(-)}$ は純粋に入っ

---

(17) 正確を期するために，つぎのことを思い出そう．重心の分離を行なう方法はいく通りもあるが，量

$$x \equiv (\sum_j M_j r_j^2)^{1/2}$$

はこのような分離の手順に無関係である．ここで $r_1, r_2, \cdots, r_j, \cdots$ はこの特殊な分離の手順に対応する相対座標を表わし，$M_1, M_2, \cdots, M_j, \cdots$ は対応する質量を表わす（第 9 章，§13 を参照）．ここで問題になっている積分の範囲は，条件 $x\leqslant X$ によって定められる．ただし X はある正の量であり，系に働く相互作用の有効距離にくらべて大きいものとする．グリーンの定理によって体積積分は超球面 $x=X$ の積分に変換され，この積分は $X\to\infty$ の極限において，（119）の右辺の式に近づくのである．

てくる波である．したがって括弧式 $\{\cdots\}_\nu$ は漸近的に0に近づく．これに反してチャンネル α と β に対しては，二つの漸近式の一方に平面波の項があるから，括弧式の寄与は0と異なる．計算は §2のときと同じであり，関係（118）の右辺の2項を与える．これで（118）が証明された．

基本関係 (118) をもっと使いやすい形に書き直そう．そのために，性質 (118) を $\hat{H}=H$ という特殊な場合に適用すると，左辺は0になり，

$$\frac{1}{M_\beta}f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)=\frac{1}{M_\alpha}f_{b\alpha}^{(-)*}(\Omega_a)$$

が成り立つ．この関係を T の定義の関係（式（114)）にくらべると，同値な定義

$$\langle b|T|a\rangle=-\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha}f_{b\alpha}^{(-)*}(-\Omega_a) \tag{114'}$$

が得られる．これら二つの定義はハミルトニアン $\hat{H}$ に伴う遷移行列 $\hat{T}$ にもそのまま適用される．これらの定義を考えに入れると，性質（118）は

$$\langle b|T|a\rangle=\langle b|\hat{T}|a\rangle+\langle\hat{\Psi}_b^{(-)}|(H-\hat{H})|\Psi_a^{(+)}\rangle \tag{120}$$

と書き表わされる．今後われわれが使うのは，この形に書かれた関係である．

チャンネル α が波 $\hat{\Psi}_b^{(-)}$ に対して閉じているときにも，$\langle b|\hat{T}|a\rangle=0$ と規約すれば，上記の関係はそのまま成り立つ．同様に，チャンネル β が波 $\Psi_a^{(+)}$ に対して閉じているときにも，$\langle b|T|a\rangle=0$ と規約すれば，この関係はそのまま成り立つ．

特に $\hat{H}=H_\beta$ ならば，$\hat{\Psi}_b^{(-)}$ は平面波 Φ_b に帰着し，$H-H_\beta=V_\beta$ であるから，関係（120）により

$$\langle b|T|a\rangle=\langle\Phi_b|V_\beta|\Psi_a^{(+)}\rangle \tag{121}$$

が得られる．

同様に，H を H_α に，$\hat{H}$ を H に置き換えれば，関係（120）から性質

$$\langle b|T|a\rangle=\langle\Psi_b^{(-)}|V_\alpha|\Phi_a\rangle \tag{122}$$

が導かれる．

これらの性質は，どの型の衝突を取り扱うときにもすべて成り立つ．すなわち弾性散乱 $(\alpha=\beta)$，非弾性散乱 $(\alpha\neq\beta, V_\alpha=V_\beta)$，転換散乱 $(V_\alpha\neq V_\beta)$ のいずれでもよい．

§20. ボルン近似とその一般化

（121）の右辺で $\Psi_a^{(+)}$ を平面波 Φ_a に置き換えれば，ボルン近似による遷移 $a\to b$ の振幅

$$T_{a\to b}\simeq T_{a\to b}^{(B)}=\langle\Phi_b|V_\beta|\Phi_a\rangle \tag{123}$$

が得られる（式（23）を参照）．

(122) の右辺で $\Psi_b^{(-)}$ を Φ_b に置き換えても，同じ近似値が得られる．実際，H を H_α に，$\hat{H}$ を H_β に置き換えれば，性質 (120) から

$$\langle\Phi_b|V_\beta|\Phi_a\rangle=\langle\Phi_b|V_\alpha|\Phi_a\rangle \tag{124}$$

が得られる．それゆえ

$$T_{a\to b}^{(\mathrm{B})}=\langle\Phi_b|V_\alpha|\Phi_a\rangle \tag{123'}$$

も確かに成り立つ．

(121) から (123) への移行は，ポテンシャル V_β が支配する領域で $\Psi_a^{(+)}$ と Φ_a の差が十分小さいときに正当とされる．(122) から (123′) への移行は，ポテンシャル V_α が支配する領域で $\Psi_b^{(-)}$ と Φ_b の差が十分小さいときに正当とされる．これら二つの近似が成り立つための条件は，見掛けは異なるけれども明らかに同値である．両方とも $\Psi_a^{(+)}$ と $\Psi_b^{(-)}$ がそれぞれ平面波 Φ_a と Φ_b に近いという仮定である．

平面波の代りに，厳密な定常解 $\Psi_a^{(+)}$ と $\Psi_b^{(-)}$ にもっと近い波動関数を使えば，いっそう正確な公式が得られる．

たとえば，V_α が

$$V_\alpha=U_\alpha+W_\alpha$$

という形に書き表わされ，エネルギー E に対するハミルトニアン $H_\alpha+U_\alpha$ の定常解をつくることができるとする．これらの解を X で表わし，対応する遷移行列を $T^{(X)}$ とする．特に，$X_a^{(+)}$ は初期条件 a に対応する《出てゆく波》の型の解であって，

$$T_{a\to b}^{(X)}=\langle\Phi_b|(H_\alpha+U_\alpha-H_\beta)|X_a^{(+)}\rangle=\langle\Phi_b|(V_\beta-W_\alpha)|X_a^{(+)}\rangle \tag{125}$$

が成り立つ．W_α が十分小さければ，$X_a^{(+)}$ は $\Psi_a^{(+)}$ とすこししか違わない．

同様に，V_β が

$$V_\beta=U_\beta+W_\beta$$

という形に書き表わされ，エネルギー E に対するハミルトニアン $H_\beta+U_\beta$ の定常解をつくることができるとする．これらの解を Ξ で表わし，これに伴う遷移行列を $T^{(\Xi)}$ とする．特に，$\Xi_b^{(-)}$ は初期条件 b に対応する《入ってくる波》の型の解であって，

$$T_{a\to b}^{(\Xi)}=\langle\Xi_b^{(-)}|(V_\alpha-W_\beta)|\Phi_a\rangle \tag{126}$$

が成り立つ．W_β が十分小さければ，$\Xi_b^{(-)}$ は $\Psi_b^{(-)}$ とすこししか違わない．

ところで，性質 (120) によれば，

$$T_{a\to b}=T_{a\to b}^{(X)}+\langle\Psi_b^{(-)}|W_\alpha|X_a^{(+)}\rangle \tag{127}$$

$$=T_{a\to b}^{(\Xi)}+\langle\Xi_b^{(-)}|W_\beta|\Psi_a^{(+)}\rangle \tag{128}$$

が成り立つ．

$T_{a\to b}$ を表わすこれら二つの式は厳密に正しい．第1式の $\Psi_b^{(-)}$ を $\Xi_b^{(-)}$ に，第2式の

$\Psi_a^{(+)}$ を $X_a^{(+)}$ に置き換えると，近似式

$$T_{a\to b} \simeq T_{a\to b}^{(X)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle \tag{129}$$

$$\simeq T_{a\to b}^{(\Xi)} + \langle \Xi_b^{(-)} | W_\beta | X_a^{(+)} \rangle \tag{130}$$

が得られる．これらの二つの式は $W_\alpha \neq W_\beta$ のとき形式上は異なるが，実はつねに等しい．そのことは，H の代りに $H_\alpha + U_\alpha$，$\hat{H}$ の代りに $H_\beta + U_\beta$ と置いて性質 (120) を適用すれば容易にわかる．

これらの公式はボルン近似 ((75) を参照) の一般化になっている．これらは，(121) の $\Psi_a^{(+)}$ をただ $X_a^{(+)}$ に置き換えて得られる式よりも良い．実際，

$$\langle \Phi_b | V_\beta | X_a^{(+)} \rangle = T_{a\to b}^{(X)} + \langle \Phi_b | W_\alpha | X_a^{(+)} \rangle$$

が成り立つ (式 (125)) から，この近似式は (127) の $\Psi_b^{(-)}$ を Φ_b に置き換えたものになっており，$\Xi_b^{(-)}$ に置き換えたものではない．同じような理由で，公式 (129) と (130) は，(122) の右辺の $\Psi_b^{(-)}$ を $\Xi_b^{(-)}$ に置き換えて得られる式よりも良い．

§ 21. 原子による速い電子の散乱

本来の意味のボルン近似を説明するための例として，原子による速い電子の散乱を考える．

われわれは，核が無限に重く，原点に固定されていると考える．この系のハミルトニアンは

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + h + V(\boldsymbol{r}, A)$$

である．第1項は入射電子の運動エネルギー，第2項は原子のハミルトニアン，第3項は相互作用エネルギー

$$V(\boldsymbol{r}, A) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^{Z} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|} \tag{131}$$

であり，$\boldsymbol{r}$ は入射電子の位置ベクトル，$\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_Z$ は原子内電子の位置ベクトルである (*)．最後に，h の固有関数列を $\varphi_0, \varphi_1, \cdots, \varphi_n, \cdots$ で表わし，対応する固有値を $e_0, e_1, \cdots, e_n, \cdots$ とする．

われわれは一つの非弾性散乱を考え，電子の運動量が $\hbar \boldsymbol{k}_0$ から $\hbar \boldsymbol{k}_n$ に移るとともに，原子が基底状態 φ_0 から励起状態 φ_n に移るとする．エネルギーは衝突の過程で保存されるから，

(*) [訳注] A は Z 個の位置ベクトル $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_Z$ を一まとめに書いたものである．すなわち

$$A = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_Z).$$

$$\hbar^2(k_0^2 - k_n^2) = 2m(e_n - e_0)$$

が成り立つ．移される運動量を $\hbar\boldsymbol{q}$ で表わす．すなわち

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}_n - \boldsymbol{k}_0.$$

ここでは関係 (24) が成り立たず，

$$q^2 = (k_0 - k_n)^2 + 4k_0 k_n \sin^2 \frac{1}{2}\theta \tag{132}$$

となることに注意する．

入射電子がその運動エネルギーの一部を失いながら単に進行方向を変えるという直接的な過程のほかにも，入射電子と原子内電子との交換ということがありうる．この交換の効果が重要なものとなる恐れのあるのは，散乱された電子の速度が原子内電子の速度と同じ程度の大きさをもつとき，すなわち $k_n a \simeq 1$ のときである(*)．ボルン近似が成り立つための条件の下では，この危険は小さいから，ここではそれを無視する．同じ考え方によって，われわれは入射電子と原子内電子とを異種の粒子として取り扱う．公式 (123) を適用すれば，ボルン近似による遷移振幅

$$T_{0\to n} \simeq \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \varphi_n^*(A) V(\boldsymbol{r}, A) \varphi_0(A) \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, \mathrm{d}A \tag{133}$$

が得られる．これはポテンシャル

$$V_n(\boldsymbol{r}) \equiv \int \varphi_n^*(A) V(\boldsymbol{r}, A) \varphi_0(A) \mathrm{d}A \tag{134}$$

のなかで，$\hbar\boldsymbol{q}$ だけ運動量を移行させられた粒子の——ボルン近似で計算された——遷移振幅である．この結果はどのような n に対しても成り立ち，弾性散乱 ($n = 0$) の場合にもそのまま適用される．

§8 で得られた式と同じような形に書き表わすために，《電子密度》

$$\rho_n(\boldsymbol{r}) = Z \int \varphi_n^*(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_Z) \varphi_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_Z) \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_Z \tag{135}$$

と，これに対応する形状因子

$$F_n(\boldsymbol{q}) = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \rho_n(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

を導入するとつごうがよい．

弾性散乱 ($n = 0$) の場合には，基底状態における電子密度とその形状因子

$$\rho_0(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r}), \qquad F_0(\boldsymbol{q}) = F(\boldsymbol{q})$$

(*) [訳注] あとでわかるように，a は原子の半径を表わす．原子内電子波の波長は a の程度であるから，運動量は $\hbar/a$ の程度であり，これが $\hbar k_n$ と同程度だから $k_n a \simeq 1$.

がもう一度得られる（式（48）を参照）．$V_0(\boldsymbol{r})$ を定義する積分のなかに，（131）で与えられた $V(\boldsymbol{r}, A)$ の具体的な式を代入すれば，$V_0(\boldsymbol{r})$ は電荷分布

$$e[Z\delta(\boldsymbol{r})-\rho(\boldsymbol{r})]$$

によって生じる場のなかにある1電子のクーロン相互作用のポテンシャルであることが確かめられる．これはまさしく，§8で採用した散乱ポテンシャルである．それゆえ，この§21で採用したモデルも十分正しいとみなされる．

ここで非弾性衝突（$n \neq 0$）を考える．$V_n(\boldsymbol{r})$ を定義する積分のなかに，（131）で与えられた $V(\boldsymbol{r}, A)$ の具体的な式を代入する．関数 φ_0 と φ_n とは直交するから，Ze^2/r の項による寄与は0である．その他の項による寄与は，電荷分布 $-e\rho_n(\boldsymbol{r})$ によって生じる場のなかにある1電子が受けるクーロン・ポテンシャルに等しい．§8の計算を繰り返せば，

$$T_{0\to n} \simeq -4\pi e^2 F_n(\boldsymbol{q}) \qquad (n \neq 0)$$

が得られ，これからボルン近似による非弾性散乱の断面積

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{0\to n}}{\mathrm{d}\Omega} = 4\frac{m^2e^4}{\hbar^4}\frac{k_n}{k_0}\frac{|F_n(\boldsymbol{q})|^2}{q^4} \tag{136}$$

が導かれる．この公式と弾性散乱に関する公式（49）のいちじるしい類似は注目される．角についての分布は因数 $|F_n(\boldsymbol{q})|^2/q^4$ によって決まる．$F_n(\boldsymbol{q})$ の一般的な挙動は $\rho_n(\boldsymbol{r})$ のそれから容易に導き出される．特に $F_n(0)=0$ が成り立つ．さらに，a を原子の半径とすれば，因子 $F_n(\boldsymbol{q})$ が0と異なるのは事実上 $qa \lesssim 1$ の範囲だけである．ボルン近似が成り立つための条件（$\gamma \ll 1$）の下では $k_0 a \gg 1$ である．このことは，入射エネルギーが原子準位のあいだの距離よりもはるかに大きいことに相当する．後者は $\hbar^2/ma^2$ の程度である．したがって $(k_0-k_n)a$ は $1/k_0 a$ の程度である．θ が0から 2π まで増すとき，q は k_0-k_n から k_0+k_n まで変わるから，この区間で qa は $1/k_0 a$ から $2k_0 a$ まで変わる（式（132）を参照）．上に述べたことから，電子は $qa \lesssim 1$ となるような角の方向，すなわち小さな角の領域

$$\theta \lesssim 1/k_0 a$$

に散乱される可能性がきわめて大きい．

原理上，非弾性散乱は電子の位置を測定するために利用することができる．入射波束の横断方向の大きさが a よりはるかに大きいと仮定すれば，その結果として運動量の横断方向の成分に関する不確定さは，$\hbar/a$ よりはるかに小さい．非弾性散乱の直後に，ある装置によって原子の量子的状態のこのような変化を検出できるとすれば，電子の位置は a の程度の不確定さで知られる．しかしその運動量の方向は $1/k_0 a$ を除いてしか定められないから，上記の運動量の横断方向の成分については $\hbar/a$ の程度の不確定さがある．このこ

とは位置の測定に関して第4章で述べたこととよく一致する（特にウィルソンの霧箱における観測についての議論，第4章の注 (7) を参照）．

§ 22.　核のクーロン励起

一般化されたボルン近似を説明する例として，第17章 §3 で取り扱った問題をもう一度取り上げ，古典近似を用いないで解いてみる．

特に断わらない限り，第17章 §3 の記号を使う．入射エネルギーは十分に低く，第17章の条件 (28) は満たされているとする．これに反して，古典的な取り扱いの根拠となっている条件，すなわち第17章の (29) と (30) は必ずしも満たされていなくてよい．入射エネルギーはクーロン障壁の高さ Ze^2/R より小さいから，衝突の過程で陽子は核のなかに事実上《侵入》しない．それゆえ，本来の意味の核相互作用は小さいと考えられる．さしあたってはこれを無視しよう．このとき衝突はハミルトニアン $H^{(0)}+V$ によって支配される．

衝突の初めの条件を a，終りの条件を b で表わし，対応する $H^{(0)}$ の固有解を $X_a^{(+)}$，$X_b^{(-)}$ とする．$H^{(0)}$ のなかで陽子の変数と核の変数とは完全に分離されているから，$X_a^{(+)}$ は初期状態 α にある核の波動関数と一つの純クーロン散乱波 $\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})$ との積であり，後者はエネルギー E と初期運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_a$ をもつ陽子がポテンシャル Ze^2/r によって受ける散乱の定常状態を表わす．同様に，$X_b^{(-)}$ は状態 β にある核の波動関数と，《入ってくる波》の型の純クーロン波 $\xi_b^{(-)}(\boldsymbol{r})$[18] との積であり，後者はエネルギー $(E-\Delta E)$ と運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_b$ をもつ陽子のポテンシャル Ze^2/r による散乱を表わす．波 $X_a^{(+)}$ はチャンネル β に何の寄与も与えないから，厳密な式 (127) により

$$T_{a\to b}=\langle\Psi_b^{(-)}|V|X_a^{(+)}\rangle$$

が得られる．V を小さな摂動として取り扱うときには，波 $\Psi_b^{(-)}$ に対する V の寄与を無視して，$\Psi_b^{(-)}$ を $X_b^{(-)}$ に置き換えることができる．その結果は一般化されたボルンの公式 (129) のように，

$$T_{a\to b}=\langle X_b^{(-)}|V|X_a^{(+)}\rangle$$

が得られる．波 X は $r<R$ に対して事実上0であるから，V をその展開式（第17章の (34)）に置き換えることができる．その結果，

$$T_{a\to b}=\sum_{lm}(-)^m R_l^{-m}\langle\beta J_\beta M_\beta|Q_l^m|\alpha J_\alpha M_\alpha\rangle$$

$$R_l^m=\frac{4\pi Ze}{2l+1}\int\xi_b^{(-)*}(\boldsymbol{r})\frac{Y_l^m(\Omega)}{r^{l+1}}\xi_a^{(+)}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\qquad(137)$$

---

(18) 球面調和関数によるこの波の展開は (77) によって与えられる．ただし F_l としては正則なクーロン解をとる．$\xi_b^{(-)}=\xi_{\bar{K}b}^{(+)*}$ に注意する．

が得られる．これに (115) を適用すれば，クーロン励起の断面積の式を得る．この式は半古典理論によって与えられる式ときわめてよく似ている．前者から後者へ移るには，正の定数 A を $A^2=4\pi^2\hbar^4 v_a/M^2 v_b$ という関係によって定め，R_l^m を $A(\mathrm{d}\sigma_R/\mathrm{d}\Omega)^{1/2}S_l^m$ に置き換えればよい．さらに，第17章の極限の条件 (29)，(30) が満たされているときには，積分 R_l^m に対する主な寄与が古典軌道の近くから生じ，停留位相の方法を適用すれば，半古典的な結果がもう一度得られる．

第17章 §3 の終りに述べた選択規則に関する議論は，ここでもそのまま繰り返される．特に，標的の核が決まった向きをもたず，励起された核の偏りが観測されないような実験においては，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{1}{(2J_\alpha+1)(2l_0+1)}\frac{M^2 v_b}{4\pi^2\hbar^4 v_a}|\langle\beta\|Q^{(l_0)}\|\alpha\rangle|^2\sum_m|R_{l_0}^m|^2$$

が得られる．

この取り扱い方を拡張して，本来の意味の核相互作用を考えに入れることもできる．陽子と核 A の核子とのあいだの核相互作用のポテンシャルを V_{pA} で表わす．これは $r<R$ に対してきわめて強く，$r>R$ に対しては事実上0になるポテンシャルである．今後 V_{pA} は $H^{(0)}$ のなかに含まれるとみなす．V については，便宜上これを外の部分 (partie externe) と内の部分 (partie interne) に分ける．すなわち，

$$V_{\text{ext.}}=\begin{cases}V & (r>R\text{ のとき})\\ 0 & (r<R\text{ のとき})\end{cases}$$

と定義して $V=V_{\text{int.}}+V_{\text{ext.}}$ と置き，$V_{\text{int.}}$ もまた $H^{(0)}$ のなかに含まれるとみなす．この修正によって，さきに注意した変数の分離は不可能となり，波 $X_a^{(+)}$ と $X_b^{(-)}$ は純粋な弾性散乱波ではなくなる．このとき，一般化されたボルン近似によって，

$$T_{a\to b}\simeq T_{a\to b}^{(X)}+\langle X_b^{(-)}|V_{\text{ext.}}|X_a^{(+)}\rangle$$

が得られる．

第1項 $T_{a\to b}^{(X)}$ は核の励起の項である．これは外部領域 ($r>R$) における陽子と核の相互作用を，点電荷のあいだのクーロン相互作用に置き換えたとき得られる遷移振幅である．このときは陽子が核に侵入しない限り励起 $\alpha\to\beta$ は生じない．第2項は本来のクーロン励起項である．

クーロン障壁の存在と核力（短い作用半径をもつきわめて強い力）の一般的挙動により，波 $X_a^{(+)}$ と $X_b^{(-)}$ は低いエネルギーにおいて，第10章（第IV節）で学んだ散乱の共鳴と同じような狭い共鳴を示す．この共鳴を特徴づけるパラメーター――いくつかの開いたチャンネルにおける共鳴のエネルギーと共鳴の幅――がわかれば，外部の領域における上

記の波を構成し ([19])，遷移振幅の2項を計算することができる．共鳴の外部では，陽子は事実上核のなかに侵入せず，$T^{(X)}_{a\to b}$ は無視することができ，クーロン励起の振幅は公式 (137) によってごく精密に与えられる．この公式のなかの波 X は純粋なクーロン散乱波である．共鳴を通過するとき，$T^{(X)}_{a\to b}$ の寄与は無視できなくなり，エネルギーの関数としてこの変化を見れば，共鳴における振幅に特有の挙動が現われる（第10章 (64) を参照）．クーロン励起の振幅もまたある修正を受けるが，ここではそれについて立ち入らない．これら二つの振幅が互いに結びついて全断面積に寄与するのである．

§23. グリーン関数と衝突の定常波の積分方程式

§13の考察は複雑な系の衝突にも容易に拡張される．ハミルトニアン H, H_α などの一つ一つに，グリーン関数 $[E-H\pm i\varepsilon]^{-1}$, $[E-H_\alpha\pm i\varepsilon]^{-1}$ などを結びつけることができる．記号をいくらか修正しさえすれば，§13の諸性質はすべてそのまま成り立ち，同じような方法で証明される．特に性質 (85)，等式 (88) と (89)，およびこれらの関数の漸近的性質が成り立つ．たとえば，任意の開いたチャンネル γ に対して，

$$\langle \boldsymbol{r}_\gamma | \frac{1}{E-H\pm i\varepsilon} | u\rangle \underset{r_\gamma\to\infty}{\sim} -\frac{M_\gamma}{2\pi\hbar^2}\varphi_\gamma \frac{e^{\pm ik_c r_\gamma}}{r_\gamma}\langle \Psi^{(\mp)}_{(\gamma,\pm \boldsymbol{k}_c)} | u\rangle \qquad (\boldsymbol{k}_c = k_c \boldsymbol{r}_\gamma / r_\gamma)$$

が得られる（式 (94) を参照）．

グリーン関数に関するこれらのいろいろな性質から，積分方程式

$$\Psi^{(\pm)}_a = \Phi_a + \frac{1}{E-H_\alpha\pm i\varepsilon} V_\alpha \Psi^{(\pm)}_a \tag{138}$$

$$\Psi^{(\pm)}_a = X^{(\pm)}_a + \frac{1}{E-H_\alpha - U_\alpha\pm i\varepsilon} W_\alpha \Psi^{(\pm)}_a \tag{139}$$

など，および公式

$$\Psi^{(\pm)}_a = \left(1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}V_\alpha\right)\Phi_a \tag{140}$$

$$= \left(1+\frac{1}{E-H\pm i\varepsilon}W_\alpha\right)X^{(\pm)}_a \tag{141}$$

が導き出される．

これらの積分方程式あるいはこれらの公式から，遷移振幅に対するボルン展開を導くのはやさしい．たとえば，(121) に (140) を代入してグリーン関数を展開すれば，つぎの式が順に得られる．

([19]) この問題の取り扱いは注 ([14]) にあげた文献に詳しく述べられている．

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b|\left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E-H+i\varepsilon} V_\alpha\right)|\Phi_a\rangle \tag{142}$$

$$= \langle \Phi_b|\left(V_\beta + V_\beta \frac{1}{E-H_\alpha+i\varepsilon} V_\alpha + \cdots\right)|\Phi_a\rangle. \tag{143}$$

第I，II節で取り扱った特殊な場合には，一つの演算子 T の行列要素として遷移振幅をすべて定めることができた．T は等式 (101) によっても，また積分方程式 (102) のどちらか一方によっても定められる．複雑な衝突の場合には，演算子を一意的に定めることができなくなる．それにもかかわらず，(142) からわかるように，チャンネル α からチャンネル β に向かうエネルギー E の遷移の確率はいずれも，

$$T^{\beta\alpha} = V_\beta + V_\beta \frac{1}{E-H+i\varepsilon} V_\alpha \tag{144}$$

によって定められる一つの演算子 $T^{\beta\alpha}$ の行列要素とみなすことができる．しかし転換衝突 ($V_\beta \neq V_\alpha$) の場合，これらの行列要素は，行列によって演算子を表現するときの通常の定義に当てはまらない．公式

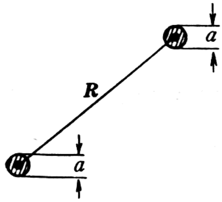
$$T_{a\to b} = \langle \Phi_b|T^{\beta\alpha}|\Phi_a\rangle \tag{145}$$

に入ってくる $|\Phi_a\rangle$ と $\langle \Phi_b|$ が直交しないからである．

§24.　二つの散乱中心による1粒子の散乱

前の §23の形式的な考察がもたらす主な利点は，それがきわめて一般的であり，複雑な問題の処理に対して一つの骨組を提供するということからくる．この形式に対してある程度慣れるために，これを簡単な場合に適用し，それからいくつかの基本的な結果をひき出してみよう．

われわれが調べようとする問題は，二つの散乱中心による1粒子の散乱，たとえば2原子による1電子の散乱である．われわれはつねに交換効果をすべて無視するが，入射粒子の波長については特別な仮定を置かない．



19·3図

散乱体をつくる原子核は無限に重いものとし，固定された二つの中心と同じようにみなす．核1を座標の原点にとり，核1から核2へ向かうベクトルを $\boldsymbol{R}$ で表わす (19·3図を参照)．距離 R は原子の大きさにくらべて大きいとする．すなわち $a \ll R$．衝突を支配するハミルトニアンは

$$H = H_0 + V \tag{146}$$

と書かれ，

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + h_1 + h_2 \qquad (146')$$

$$V = V_1 + V_2 \qquad (146'')$$

において，h_1 と h_2 はそれぞれ原子1と2のハミルトニアン，V_1 と V_2 はそれらと入射粒子との相互作用ポテンシャルである．最後に，自由波のグリーン関数を G_0 で表わす．すなわち

$$G_0 \equiv (E - H_0 + \mathrm{i}\varepsilon)^{-1}.$$

2原子によるこの粒子の散乱が弾性的であっても非弾性的であっても，散乱に伴う遷移行列 T はボルン展開

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \cdots \qquad (147)$$

によって表わされる(*)．この展開の V を $V_1 + V_2$ に置き換えると，V_1 と V_2 による T のべき級数展開

$$T = V_1 + V_2 + V_1G_0V_1 + V_1G_0V_2 + V_2G_0V_1 + V_2G_0V_2 + V_1G_0V_1G_0V_1 + V_1G_0V_1G_0V_2 + \cdots$$

を得る．

以下の議論において，われわれは V_1 と V_2 の強さに関する特別な仮定をまったく設けない．それゆえ，この展開の収束は必ずしも速くはなく，このままでは近似法の出発点として役に立たない．しかし，展開式の各項をうまくグループ別に分けることによって，速く収束する形に書き直してみよう．

そのための根拠として，つぎのことに注意する．2次の項 $V_1G_0V_2$ を考え，$\boldsymbol{r}$ を対角型にする表現においてこの項の行列要素を計算してみる．G_0 は自由波のグリーン関数であるから，その行列要素はいずれも因数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ を含む．V_1 は実質的に原点のまわりの小さな領域に局在し，V_2 は点 $\boldsymbol{R}$ のまわりの小さな領域に局在するから，この因数は $1/R$ の程度である．同じことが項 $V_2G_0V_1$ にも当てはまる．おおよそのところ，項 $V_1G_0V_2$ と $V_2G_0V_1$ は項 $V_1G_0V_1$ と $V_2G_0V_2$ にくらべて小さく，約 a/R 倍である．この注意はさらに高次の項についても適用される．そして V_1 と V_2 のあいだに G_0 が現われる回数によっていろいろな項を分類すればよいことを示唆する．今後は，V_1 と V_2 のあいだに G_0 がまったく現われない項を1次の項，1回だけ現われる項を2次の項，…，$(n-1)$ 回現われる項を n 次の項などと呼ぶことにする．この用語によれば $V_1G_0V_1$ と $V_2G_0V_2$ は1次の項，$V_1G_0V_2$ と $V_2G_0V_1$ は2次の項である．

$$T_i = V_i + V_iG_0T_i = V_i + V_iG_0V_i + V_iG_0V_iG_0V_i + \cdots \qquad (i = 1, 2) \qquad (148)$$

によって定義される個別的な遷移行列 T_1，T_2 を導入する．T_1 は，入射粒子と原子2と

(*) ［訳注］ T に対する方程式 (102b) を参照．

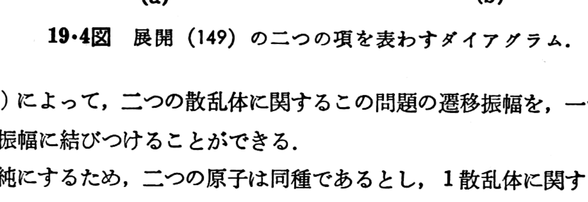
の相互作用を無視する場合，原子1による散乱に伴う遷移行列である．T_2 は，原子1との相互作用を無視する場合，原子2による散乱を与える行列である．演算子 T_1，T_2，G_0 を使えば，決まった次数をもつ項の寄与が簡単に書き表わされる．その式をつくる法則は簡単な視察によって容易に定められる．1次の寄与は T_1+T_2，2次の寄与は $T_1G_0T_2+T_2G_0T_1$ など．こうして

$$T=(T_1+T_2)+(T_1G_0T_2+T_2G_0T_1)+(T_1G_0T_2G_0T_1+T_2G_0T_1G_0T_2)+\cdots \quad (149)$$

が得られる．

展開 (149) がわれわれの求めた出発点である．それぞれの項を解釈することはやさしい．1次の各項は原子1（項 T_1）または原子2（項 T_2）によるこの粒子の単純な散乱を表わす．2次の各項は2重散乱を表わす．たとえば，$T_1G_0T_2$ を考えると，まず原子2による入射粒子の散乱（演算子 T_2），ついでこのように原子2によって散乱された粒子の1への伝播（演算子 G_0），最後に原子1によるこの粒子の散乱（演算子 T_1）が表わされている．同様に n 次の各項が表わすこの粒子の散乱は，原子1と2により交互にひきつづき n 回行なわれるものである．

このように各項に結びつけられたメカニズムは，時間を含む摂動の理論で用いられたダイアグラム（17・1図）と同種のダイアグラムによって図式的に表わされる．これらのダイアグラムのうちの二つを19・4図に示す．



19・4図 展開 (149) の二つの項を表わすダイアグラム．

展開 (149) によって，二つの散乱体に関するこの問題の遷移振幅を，一つの散乱体に関する問題の振幅に結びつけることができる．

議論を単純にするため，二つの原子は同種であるとし，1散乱体に関する問題，すなわちこれらのうち原点に置かれたただ一つの原子による粒子の散乱について，エネルギー e に対する遷移行列を $t(e)$ で表わす．

運動量 $\hbar k$ の入射粒子を表わす平面波 $e^{ik\cdot r}$ と，原子1の波動関数 φ_m および原子2の波動関数 φ_n との積に対応する H_0 の固有ベクトルを $|kmn\rangle$ によって表わす．すなわち

$$H_0|\boldsymbol{k}\,m\,n\rangle = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + e_m + e_n\right)|\boldsymbol{k}\,m\,n\rangle.$$

ここで採用する規格化では

$$\langle \boldsymbol{k}'\,m'\,n'|\boldsymbol{k}\,m\,n\rangle = (2\pi)^3\,\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\delta_{mm'}\,\delta_{nn'}$$

が成り立つものとする．同様に，1散乱体の問題で，平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ と原子の波動関数 φ_m との積を $|\boldsymbol{k}\,m\rangle$ で表わす．

T_1 の定義 (148) から，容易に

$$\langle \boldsymbol{k}'\,m'\,n'|\,T_1(E)\,|\boldsymbol{k}\,m\,n\rangle = \delta_{nn'}\langle \boldsymbol{k}'\,m'|\,t(E-e_n)\,|\boldsymbol{k}\,m\rangle \tag{150}$$

が導き出される．同様に，行列 T_2 の要素は，点 $\boldsymbol{R}$ に置かれたただ一つの原子による散乱に伴う遷移行列の要素と結びつけられる．後者を $t(e)$ から導き出すには，$\boldsymbol{R}$ だけ全体を並進させればよい．その結果（問題5），

$$\langle \boldsymbol{k}'\,m'\,n'|\,T_2(E)\,|\boldsymbol{k}\,m\,n\rangle = \delta_{mm'}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}}\langle \boldsymbol{k}'\,n'|\,t(E-e_m)\,|\boldsymbol{k}\,n\rangle. \tag{151}$$

公式(150)と(151)はすべての遷移に対して無制限に適用でき，状態 $|\boldsymbol{k}\,m\,n\rangle$ と $|\boldsymbol{k}'\,m'\,n'\rangle$ が E と異なるエネルギーをもつ場合にも成り立つ．

§25. 単純な散乱．干渉

展開 (149) の第一の応用として，2原子による粒子の弾性散乱の断面積を計算する．

具体的に考えるために，二つの原子は基底状態 φ_0 にあり，またそれにとどまると仮定し，入射波および散乱波の波数ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{k}_0$ および $\boldsymbol{k}$ で表わす．それゆえ遷移 $(\boldsymbol{k}_0\,0\,0)\to(\boldsymbol{k}\,0\,0)$ が問題になり，

$$k = k_0, \qquad E = \hbar^2 k^2/2m + 2e_0$$

が成り立つ．

遷移確率を計算するために，展開 (149) を1次の項で打ち切る．すなわち

$$T \simeq T_1 + T_2. \tag{152}$$

関係 (150) と (151) を考えに入れ，

$$\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0, \qquad \langle \boldsymbol{k}\,0|\,t(E-e_0)\,|\boldsymbol{k}_0\,0\rangle \equiv \langle \boldsymbol{k}|\,t\,|\boldsymbol{k}_0\rangle$$

と置けば，

$$\langle \boldsymbol{k}\,0\,0|\,T\,|\boldsymbol{k}_0\,0\,0\rangle \simeq [1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}]\langle \boldsymbol{k}|\,t\,|\boldsymbol{k}_0\rangle \tag{153}$$

を得る．

これは初等的な干渉の理論において散乱振幅を与える関係であることがわかる．これによって，2原子による弾性散乱の断面積 $\mathrm{d}\Sigma/\mathrm{d}\Omega$ を，遷移 $(\boldsymbol{k}_0\,0)\to(\boldsymbol{k}\,0)$，すなわちただ一つの原子による同じ弾性散乱の断面積 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ に結びつけることができる．前者は $\langle \boldsymbol{k}\,0\,0|\,T\,|\boldsymbol{k}_0\,0\,0\rangle$ の絶対値の二乗に適当な因数を掛けたものであり，後者は $\langle \boldsymbol{k}|\,t\,|\boldsymbol{k}_0\rangle$ の

絶対値の二乗に同じ因数を掛けたものである．それゆえ (153) から

$$d\Sigma/d\Omega \simeq 2I(\Omega)d\sigma/d\Omega \tag{154}$$

$$I(\Omega) = 1 + \cos(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}) \tag{155}$$

が導かれる．公式 (154) のなかに因数 $I(\Omega)$ が現われるのは，各原子による散乱波のあいだの干渉による．もしもこの干渉の現象が起こらないとすれば，$I(\Omega)=1$ が成り立ち，断面積 $d\Sigma/d\Omega$ は単に原子 1 と 2 の一つ一つによる散乱の断面積の和になるであろう．

$I(\Omega)$ の挙動を散乱方向の関数として吟味すれば，干渉の理論から生じる通常の諸結果がもう一度容易に見いだされる．ここでは波長 $\lambda = 2\pi/k$ が R にくらべてきわめて大きいかまたはきわめて小さいという二つの極限の場合を論じるだけにしておく．

$\lambda \gg R$ ならば，どの散乱方向に対しても $(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}) \ll 1$，したがって $I(\Omega)=2$．それゆえ 2 原子による散乱の断面積は個別的な断面積の 4 倍，すなわち干渉の現象が存在しないと仮定した場合の 2 倍である．

$\lambda \ll R$ ならば，散乱方向を変化させるにつれて，$I(\Omega)$ は極値 0 と 2 のあいだを急速に振動する．ベクトル $\boldsymbol{k}_0$ および $\boldsymbol{k}$ が $\boldsymbol{R}$ に対してつくる角をそれぞれ α_0 および α とすれば，

$$(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}) = \frac{2\pi R(\cos\alpha_0 - \cos\alpha)}{\lambda}$$

である．したがって，$(\cos\alpha - \cos\alpha_0)$ が λ/R の半整数倍になるごとに $I(\Omega)$ は 0 となり，$(\cos\alpha - \cos\alpha_0)$ が λ/R の整数倍になるごとに $I(\Omega)$ は 2 に等しくなる．対応する α の値によって，最小の干渉の方向と最大の干渉の方向がそれぞれ定められる．干渉縞の幅は λ/R の程度である．これらの干渉を観測できるかどうかは，検出装置の角分解能による．この装置は有限な大きさ $\delta\Omega \equiv (\delta\alpha)^2$ をもつ一つの立体角に放出された粒子を数える．数えた結果の比率は，この有限な領域における $d\Sigma/d\Omega$ の積分によって与えられる．この領域のなかでは，$d\Sigma/d\Omega$ が角によってどう変わるかは，実質的に因数 $I(\Omega)$ によって定められる．$\delta\alpha \gg \lambda/R$ ならば，$I(\Omega)$ は問題の領域で数多くの振動を行なうから，その平均値によって置き換えることができる．すなわち，$I(\Omega)=1$ が成り立ち，2 原子の一つ一つによる散乱波のあいだには何の位相関係も存在しないかのように，すべてのことが起こる [20]．反対に $\delta\alpha \ll \lambda/R$ ならば，$I(\Omega)$ はこの領域で事実上一定であり，検出器の分解能は干渉の現象を観測しうる程度に高い．

今度は非弾性衝突を考え，その過程で 2 原子のうちの一つが基底状態から n 番目の励

(20) 第 10 章 §2 において，一つの標的が独立な多くの散乱体から成るとみなされるための条件を定めたが，そのときに述べたことは上の結果によって確かめられ，精密化される．

起状態に移るとする．散乱波の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}$ で表わせば，

$$E=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}+e_0+e_n$$

が成り立つ．断面積 $\mathrm{d}\Sigma_n/\mathrm{d}\Omega$ は，遷移 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_n n 0)$ と $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_n 0 n)$ にそれぞれ対応する断面積 $\mathrm{d}\Sigma_{n0}/\mathrm{d}\Omega$ と $\mathrm{d}\Sigma_{0n}/\mathrm{d}\Omega$ の和である．これらを計算するのに，T の展開のなかから単純散乱の項だけを残し，近似式 (152) を使えば困難はない．遷移 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_n n 0)$ においては，原子1が励起され，原子2は基底状態にとどまる．T_2 の寄与は明らかに0であり（式 (151) を参照），T_1 の寄与は $\mathrm{d}\sigma_n/\mathrm{d}\Omega$，すなわちただ一つの原子によるこの粒子の非弾性散乱 $(\boldsymbol{k}_0 0)\to(\boldsymbol{k}_n n)$ の断面積を与える．遷移 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k}_n 0 n)$ では事情が逆になり，T_1 の寄与は 0，T_2 の寄与は $\mathrm{d}\sigma_n/\mathrm{d}\Omega$ を与える．それゆえ，結論として，

$$\mathrm{d}\Sigma_n/\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}\Sigma_{n0}/\mathrm{d}\Omega+\mathrm{d}\Sigma_{0n}/\mathrm{d}\Omega=2\mathrm{d}\sigma_n/\mathrm{d}\Omega.$$

弾性散乱のときに起こったことと反対に，散乱体の各原子はそれぞれ孤立しているように働く．原子1による非弾性散乱波と原子2による非弾性散乱波は異なるチャンネルに対応し，互いに干渉できないのである．

§26. 多重散乱

今度は遷移 $(\boldsymbol{k}_0 00)\to(\boldsymbol{k} pq)$ を考え，この過程で原子1と2が基底状態からそれぞれ p 番目と q 番目の励起状態に移るとする．すなわち

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+e_p+e_q.$$

この遷移の断面積を $\mathrm{d}\Sigma_{pq}/\mathrm{d}\Omega$ で表わす．

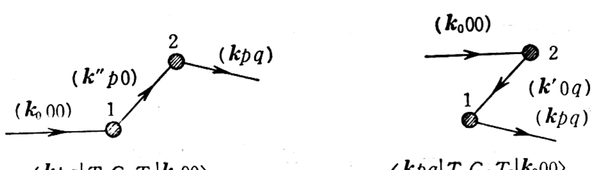
この遷移で二つの原子が量子状態を変えるのであるから，単純散乱の項 T_1 と T_2 の寄与は厳密に0であり，T の展開を2次の項まで進める必要が生じる．その結果は

$$\langle \boldsymbol{k} pq|T|\boldsymbol{k}_0 00\rangle\simeq A_{12}+A_{21}, \tag{156}$$

ただし

$$A_{ij}\equiv\langle \boldsymbol{k} pq|T_i G_0 T_j|\boldsymbol{k}_0 00\rangle. \tag{157}$$

19·5図によって与えられたダイアグラムは，これら二つの2重散乱の振幅を表わす．



19·5図 2重散乱の振幅のダイアグラム．

まず振幅 A_{21} を計算する．条件 $a \ll R$ を考慮に入れるために，表現 $\{\boldsymbol{r}\,m\,n\}$ においてこの計算を行なうのがよい．G_0 が h_1 および h_2 と交換することに注意すれば，

$$A_{21} = \iint f_2(\boldsymbol{r}'')g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')f_1(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}''\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}', \tag{158}$$

ただし

$$f_1(\boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r}'\,p\,0|\,T_1\,|\,\boldsymbol{k}_0\,0\,0\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}\langle \boldsymbol{k}'\,p\,0|\,T_1\,|\,\boldsymbol{k}_0\,0\,0\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}' \tag{159}$$

$$f_2(\boldsymbol{r}'') \equiv \langle \boldsymbol{k}\,p\,q|\,T_2\,|\boldsymbol{r}''\,p\,0\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{r}''}\langle \boldsymbol{k}\,p\,q|\,T_2\,|\,\boldsymbol{k}''\,p\,0\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{k}'' \tag{160}$$

$$g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') \equiv \langle \boldsymbol{r}''\,p\,0|\,G_0\,|\,\boldsymbol{r}'\,p\,0\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_p|\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}'|} \tag{161}$$

を得る．最後の式のなかで，K_p は

$$E = \frac{\hbar^2 K_p^2}{2m} + e_p + e_0$$

によって定められる正の量である．また，

$$\boldsymbol{K}_p \equiv K_p \boldsymbol{R}/R$$

によって定められるベクトル $\boldsymbol{K}_p$ も用いられる．

T_1 の性質により，関数 $f_1(\boldsymbol{r}')$ が目立つ値をとるのは，原点を囲む大きさ a の領域だけである．また T_2 の性質により，関数 $f_2(\boldsymbol{r}'')$ が目立つ値をとるのは，点 $\boldsymbol{R}$ を囲む大きさ a の領域だけである．したがって，積分 (158) のなかの $g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')$ は，これを $\boldsymbol{r}'/R$ と $(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{R})/R$ のべき級数に展開し，その第1項に置き換えることができる．その結果 A_{21} の計算に対して生じる誤差は a/R の程度である．

この方法によれば，

$$|\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}'| \simeq R + \boldsymbol{R}\cdot(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}')/R + \cdots$$

であるから，

$$g(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{K}_p\cdot(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}')}}{R} \tag{162}$$

と書くことができる．(159), (160), (162) を (158) の右辺に代入すれば，積分は容易に行なわれ，

$$A_{21} \simeq -(m/2\pi\hbar^2 R)\langle \boldsymbol{k}\,p\,q|\,T_2\,|\,\boldsymbol{K}_p\,p\,0\rangle\langle \boldsymbol{K}_p\,p\,0|\,T_1\,|\,\boldsymbol{k}_0\,0\,0\rangle \tag{163}$$

を得る．

同じように，

$$\boldsymbol{K}_q \equiv -\frac{K_q\boldsymbol{R}}{R}, \qquad E = \frac{\hbar^2 K_q^2}{2m} + e_0 + e_q$$

によってベクトル $\boldsymbol{K}_q$ を定めると，A_{12} を表わす式として

$$A_{12} \simeq -(m/2\pi\hbar^2 R)\langle \boldsymbol{k}\, p\, q \,|\, T_1 \,|\, \boldsymbol{K}_q 0\, q\rangle\langle \boldsymbol{K}_q 0\, q \,|\, T_2 \,|\, \boldsymbol{k}_0 0\, 0\rangle \tag{164}$$

が得られ，誤差は a/R の程度である．(163) と (164) に現われる T_1 と T_2 の行列要素は，エネルギーを保存する遷移に対応するものであることに注意する．関係 (150) と (151) を適用すれば，ただ一つの原子による非弾性散乱に関する遷移振幅の関数として A_{21} と A_{12} を表わすことができる．断面積 $\mathrm{d}\Sigma_{pq}/\mathrm{d}\Omega$ についても同じことが言える．実際，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\Sigma_{pq}}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar v_0}|A_{21}+A_{12}|^2\rho(E)\\ &= \frac{2\pi}{\hbar v_0}|A_{21}|^2\rho(E)+\frac{2\pi}{\hbar v_0}|A_{12}|^2\rho(E)+\frac{2\pi}{\hbar v_0}(A_{21}^*A_{12}+A_{21}A_{12}^*)\rho(E)\end{aligned} \tag{165}$$

が成り立つからである．計算の結果は

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\Sigma_{pq}/\mathrm{d}\Omega &= (\mathrm{d}\sigma_p(\boldsymbol{k}_0\to\boldsymbol{K}_p)/R^2\mathrm{d}\Omega)(\mathrm{d}\sigma_q(\boldsymbol{K}_p\to\boldsymbol{k})/\mathrm{d}\Omega)\\ &\quad+(\mathrm{d}\sigma_q(\boldsymbol{k}_0\to\boldsymbol{K}_q)/R^2\mathrm{d}\Omega)(\mathrm{d}\sigma_p(\boldsymbol{K}_q\to\boldsymbol{k})/\mathrm{d}\Omega)+\text{干渉の項}\end{aligned} \tag{166}$$

となる．干渉の項を書くことは読者に任せる．この式のなかで，記号 $\mathrm{d}\sigma_n(\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}')/\mathrm{d}\Omega$ はただ一つの原子による粒子の非弾性散乱 $(\boldsymbol{k}0)\to(\boldsymbol{k}'n)$ の断面積を表わす．

公式 (166) の初めの 2 項は，初等的な古典的推論によって得られるものと正確に同じである．実際，古典的用語によって論じるならば，2 重散乱は二つの異なる形で生じる．すなわち，粒子がまず原子 1 により原子 2 に向かって非弾性的に散乱され，ついで原子 2 により最終方向に非弾性的に散乱される場合と，まず原子 2 により原子 1 に向かって散乱され，ついで原子 1 により最終方向に散乱される場合である．これら二つの過程の断面積はそれぞれ (166) の第 1 項と第 2 項である．そのほかに，これら二つの型の散乱波のあいだの干渉に由来する項を付け加えなければならないことをわれわれは知ったのである．この干渉の項についても，§25 で述べた注意と同じような注意を与えることができる．これを観測しうるためには，検出器の分解能が十分に強く，λ/R の程度の角を区別できなくてはならない．

$\lambda \ll a$ のときは，個別的な断面積が実質上進行方向に集中し，散乱振幅は λ/a より大きな偏りに対して実際上 0 になる．したがって——(163)，(164)，(165) を調べれば容易に納得されるように——2 重散乱の生じる可能性があるのは，λ/a 程度の違いは無視して二つの原子が入射方向に並んでいるとき，すなわち $\boldsymbol{k}_0 /\!/ \boldsymbol{R}$ または $\boldsymbol{k}_0 /\!/ (-\boldsymbol{R})$ のときだけである．第一の場合，A_{12} は無視されるが，A_{21} は小さな偏りに対して——すなわち λ/a を除いて $\boldsymbol{k} /\!/ \boldsymbol{k}_0$ であるとき——0 とかなり異なる．粒子はまず原子 1 により，ついで原子 2 により，入射方向とほぼ平行な方向に散乱される．第二の場合は原子 1 と 2 の役割が逆になる．ウィルソンの霧箱のなかでイオン化する粒子の《軌道》を観測するとき，この観測は本質的に上記の結果に基づく（第 4 章，注 (7) を参照）．

IV. 遷移振幅の変分による計算

§27. 位相のずれに対する停留表示

変分法はすでにエネルギー準位を定めるために用いられている（第18章）. この節では位相のずれ，あるいはもっと一般に遷移振幅を計算するため，変分法がどのように利用されるかを簡単に説明する．各振幅を変分法で決定するには，波動関数に対して定義された汎関数のうち，衝突の状態を正確に表わす波動関数に対して停留値をとるものが知られ，さらに上記の振幅がちょうどこの汎関数の停留値に等しくなればよい (*). 前の数節で与えられた確率振幅の積分表示は停留値をとらないため，この目的に適しない．たとえば，T_l を表わす式 (54) は ϕ_l の汎関数とみなすことができるが，ϕ_l が動径方程式の正確な解であるときに停留値をとらない．また，$T_{a\to b}$ を表わす (127) も $\Psi_b^{(-)}$ の汎関数とみなしうるが，$\Psi_b^{(-)}$ が正しい値の近くを動くとき停留値をとらない．これらの量に対してはいくつかの停留表示が提案されている．ここでは最も役に立つと思われるものをあげよう．それはシュウィンガーによるものである ([21]).

この §27 では，中心力ポテンシャル内の1粒子の場合を考え，球面調和関数による遷移確率の展開 (51) の係数 T_l に対して，一つの停留表示を求める．以下に詳しく述べるようないくつかの修正を除けば，§9 の記号をそのまま用いる．

$\phi_a^{(+)}$ を散乱の定常波とすれば，部分波 ϕ_l は積分方程式 (56) の解である．あとの一般化を考慮して，(56) を

$$\phi_l(r) = j_l(kr) + g_l^{(+)} V\phi_l \tag{167}$$

という形に書いておく．ここで $g_l^{(+)}$ は積分演算子であって，グリーン関数

$$g_l^{(+)}(r, r') \equiv -(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr_<)\, h_l^{(+)}(kr_>) \tag{168}$$

を核にもつものである．言いかえれば，

$$g_l^{(+)} V\phi_l \equiv \int_0^\infty g_l^{(+)}(r, r')\, V(r')\phi_l(r') r'^2 \mathrm{d}r'.$$

またこれらの記号に合わせて，二つの動径関数 φ_1, φ_2 の内積を表わすために記号 $\langle\varphi_1, \varphi_2\rangle$ を使う．すなわち

(*) ［訳注］ このような汎関数を，著者は遷移振幅の停留表示 (expression stationnaire) と呼んでいる．

([21]) 特に B. LIPPMANN と J. SCHWINGER, 前掲論文 (107 頁) を見よ．位相のずれを計算するために提案されたいろいろな変分表示について，それぞれの長所を論じたものは，M. MOE と D. S. SAXON, *Phys. Rev.*, **111** (1958), 950.

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \equiv \int_0^\infty \varphi_1^*(r)\varphi_2(r)r^2\,\mathrm{d}r.$$

その結果 T_l の積分表示 (54) は

$$T_l = \langle j_l, V\phi_l \rangle \tag{169}$$

と書かれる．

ここで，

$$A[\phi] \equiv \langle j_l, V\phi \rangle = \langle \phi^*, Vj_l \rangle = \int_0^\infty j_l(kr)V(r)\phi(r)r^2\,\mathrm{d}r, \tag{170}$$

$$B[\phi] \equiv \langle \phi^*, (V - Vg_l^{(+)}V)\phi \rangle \tag{171}$$

$$= \int_0^\infty \phi^2(r)V(r)r^2\,\mathrm{d}r - \int_0^\infty\int_0^\infty (\phi(r)V(r)g_l^{(+)}(r,r')V(r')\phi(r'))r^2\,\mathrm{d}r\,r'^2\,\mathrm{d}r'$$

と置き，関数 ϕ に依存する汎関数

$$\mathscr{T}_l[\phi] \equiv \frac{A^2}{B} \tag{172}$$

を考える．ϕ の動く範囲は，$r^2|\phi|^2$ が局所的に積分可能であるという条件だけで定める．

こうすれば

$$\mathscr{T}_l[\phi_l] = T_l$$

が成り立つ．これは積分方程式 (167) と T_l を表わす式 (169) から得られる明白な結果である．

また，$\mathscr{T}_l$ は関数 ϕ の規格化にも依存せず (任意の定数を ϕ に掛けても変わらない)，$V(r)=0$ となる領域でこの関数がとる値にも依存しないことに注意する．それゆえ，方程式 (167) よりも弱い条件

$$V(r) \neq 0 \text{ のとき} \qquad \phi_l(r) = Cj_l(kr) + g_l^{(+)}V\phi_l \tag{167a}$$

(C は任意の定数) を満たす任意の関数 ϕ_l に対して，$\mathscr{T}_l$ は同じ値 T_l をとる．

$\delta\phi$ の関数として変分 $\delta\mathscr{T}_l$ を計算しよう．定義 (172) から，

$$\delta\mathscr{T}_l = \frac{2A}{B}\delta A - \frac{A^2}{B^2}\delta B$$

が導かれる．明らかに

$$\delta A = \int_0^\infty \delta\phi\, V(r)j_l(kr)r^2\,\mathrm{d}r = \langle \delta\phi^*, Vj_l \rangle$$

であり，V が実関数で $g_l^{(+)}(r,r')$ が r と r' に関して対称であることを考えに入れれば，

$$\delta B = 2\langle \delta\phi^*, (V - Vg_l^{(+)}V)\phi \rangle.$$

それゆえ，

$$F(r) = B[\phi]V(r)j_l(kr) - A[\phi]V(r)(\phi - g_l^{(+)}V\phi)$$

と置けば，

$$\delta\mathcal{T}_l = \frac{2A}{B^2}\langle\delta\phi^*, F\rangle$$

と書くことができる．どのような $\delta\phi$ に対しても $\delta\mathcal{T}_l = 0$ となるためには，$F(r)$ が恒等的に0になることが必要十分である．そのためには，$V(r)$ が0でないすべての点で $j_l(kr)$ と $\phi - g_l^{(+)}V\phi$ とが比例しなければならない．すなわち，ϕ は条件（167a）を満たす関数 ϕ_l の一つであることが必要である．この条件が十分であることも容易に確かめられる．要約すれば，$\mathcal{T}_l$ の停留値は求める振幅に等しい．すなわち，

$$T_l = \mathcal{T}_l|_{\text{st.}} \tag{173}$$

実関数の範囲で計算するためには，$g_l^{(+)}(r, r')$ を実部と虚部に分けるのがよい．実部はグリーン関数

$$g_l^{(1)}(r, r') \equiv -(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr_<)\, n_l(kr_>)$$

であり，

$$g_l^{(+)}(r, r') = g_l^{(1)}(r, r') - \mathrm{i}(2mk/\hbar^2)\, j_l(kr)\, j_l(kr')$$

となる．この式を $\mathcal{T}_l$ の定義式に（すなわち $B[\phi]$ を表わす式（171）に）代入すれば，（173）は

$$T_l^{-1} = \mathcal{T}_l^{-1}|_{\text{st.}} = \left.\frac{\langle\phi^*, (V - Vg_l^{(1)}V)\phi\rangle}{\langle j_l, V\phi\rangle^2}\right|_{\text{st.}} + \mathrm{i}\frac{2mk}{\hbar^2}$$

という形に書き直され，これは（173）と同値である．（52）により

$$T_l^{-1} - \mathrm{i}(2mk/\hbar^2) = -2mk\cot\delta_l/\hbar^2$$

であるから，$k\cot\delta_l$ に対してつぎのような停留表示が導き出される：

$$k\cot\delta_l = -\frac{\hbar^2}{2m}\left.\frac{\langle\phi^*, (V - Vg_l^{(1)}V)\phi\rangle}{\langle j_l, V\phi\rangle^2}\right|_{\text{st.}} \tag{174}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left.\frac{\int_0^\infty \phi^2 Vr^2\mathrm{d}r - \int_0^\infty\int_0^\infty (\phi(r)V(r)g_l^{(1)}(r, r')V(r')\phi(r'))r^2\mathrm{d}r\, r'^2\mathrm{d}r'}{\left[\int_0^\infty j_l(kr)V(r)\phi(r)r^2\mathrm{d}r\right]^2}\right|_{\text{st.}}.$$

容易に示されるように，（174）の右辺に停留値を与える関数 ϕ_l は実数と考えてよく，このような実の条件を試験関数に課しても，得られる変分の性質は変わらない．

§28.　位相のずれの変分による計算．議論

位相のずれの変分による計算法の出発点は（174）である．そのために，いくつかのパラメータによって定められる試験関数 φ を ϕ のところに代入して右辺の汎関数を計算し，〔その結果を上記のパラメータの関数と考え〕パラメータの変化に対するこの関数の停留値を求める．試験関数 φ が厳密解 ϕ_l に近いほど，こうして得られる $k\cot\delta_l$ の近似値は厳密な値に近くなる．実際，すでに注意したように――またこれがシュウィンガーによ

る変分法の長所の一つであるが——結果は φ の規格化にも，ポテンシャル V が0になる領域で φ がとる値にも無関係である．それゆえこの方法を精密にするためには，ポテンシャルが作用する領域で厳密解と同じような一般的挙動をとる関数を試験関数として採用すればよい．誤差の評価は本質的にこのような半定量的考察に基づいて行なわれる．それはエネルギー準位の変分による計算と同様，多分に経験的である．

(174) の右辺の ψ に自由波 $j_l(kr)$ を代入するだけにすれば，

$$k\cot\delta_l \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1-\Delta_l}{\langle j_l, Vj_l\rangle} \tag{175}$$

が得られる．ただし Δ_l は

$$\Delta_l \equiv \frac{\langle j_l, Vg_l^{(1)}Vj_l\rangle}{\langle j_l, Vj_l\rangle} \tag{176}$$

によって定める．この公式はボルン近似によって与えられる公式（第10章 (75)）よりも本質上精密である．実際，$\Delta_l \ll 1$ となる極限において，これはボルンの第2近似に同値である．そればかりでなく，Δ_l が小さくないときには，公式 (175) はボルンの第2近似によって与えられる公式よりはるかに精密であることが多い．

これら二つの近似法を具体的に比較するために，ごく低いエネルギーの極限において，球形の井戸型ポテンシャルによる s 散乱を取り扱ってみる．すなわち

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r < r_0 \text{ のとき}) \\ 0 & (r > r_0 \text{ のとき}) \end{cases} \tag{177}$$

と仮定して，上に述べたいくつかの方法で衝突の長さ

$$a = -\lim_{k\to 0}(k\cot\delta)^{-1}$$

を計算し，それらの結果を厳密な計算による結果と比較してみよう．これらの計算はそれほどむずかしくはない．

$$b = (2mV_0r_0^2/\hbar^2)^{1/2}$$

と置けば，結果はつぎのような式で与えられる．

厳密な値： $$a = -\left(\frac{\tan b}{b} - 1\right)r_0$$

変分による計算（公式 (175)）： $$a_{\text{var.}} = -\frac{b^2/3}{1-0.4b^2}r_0$$

ボルンの第1近似： $$a_{\text{B}}^{(1)} = -\frac{1}{3}b^2 r_0$$

ボルンの第2近似： $$a_{\text{B}}^{(2)} = -\left(\frac{1}{3}b^2 + \frac{2}{15}b^4\right)r_0.$$

ボルン近似が成り立つための判定条件は不等式 (43) によって与えられる．すなわち

$$b \ll 1$$

(b はポテンシャルの深さ，すなわち束縛 s 状態の個数を測る一つの尺度である)．上記の四つの公式による結果の数値は，つぎの 19•1 表に示される．これから確かめられるように，比較的大きな b の値，すなわち領域 $\pi/2 < b < \pi$ の内部から端に至るまでの値に対して，$a_{\text{var.}}$ はつねにきわめて良い近似値を与える．一方，この領域でボルン近似は確かに収束しない．

19•1表 パラメータ $b = (2mV_0r_0^2/\hbar^2)^{1/2}$ の関数として衝突の半径を計算する際の，いろいろな方法による結果の比較．r_0 を長さの単位とする．

	厳密な値	停留公式 (175)	ボルン近似	
			第2近似	第1近似
b	a	$a_{\text{var.}}$	$a_{\text{B}}^{(2)}$	$a_{\text{B}}^{(1)}$
0	0	0	0	0
0.1 π	−0.034	− 0.034	−0.034	−0.033
0.2 π	−0.156	− 0.156	−0.152	−0.132
0.3 π	−0.460	− 0.459	−0.401	−0.296
0.4 π	−1.449	− 1.428	−0.859	
0.5 π	∞ *)	−63.2 **)	−1.63	
0.6 π	2.63	2.81	−2.9	
0.7 π	1.63	1.72		
0.8 π	1.29	1.38		
0.9 π	1.11	1.21		
π	1.00	1.12		

*) $a = \infty$ は，エネルギー 0 の束縛状態が存在することに当たる．
**) $a_{\text{var.}}$ は $b = 0.503\,\pi$ で無限大になり，ここで符号を変える．

§29. 複雑な衝突への拡張

上に展開した議論はもっと一般の衝突問題にも拡張される．いろいろな拡張の可能性に関する詳細には立ち入らないことにして，ここでは二つの複雑な粒子の――弾性的あるいは非弾性的な――散乱の場合を取り上げ，遷移行列の停留表示を与えるだけにしよう．

特に断わらない限り，第 III 節の記号をそのまま使う．遷移 $a \to b$ の振幅は

$$T_{a\to b} = \langle \Phi_b | V_\beta | \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_\alpha | \Phi_a \rangle$$

によって与えられる．これらの式は $\Psi_a^{(+)}$ または $\Psi_b^{(-)}$ の変分に関して停留値をとらない．ある一つの散乱が問題になっているから，摂動のないハミルトニアンは同じである．それゆえ，

$$H_\alpha = H_\beta = H_0, \qquad V_\alpha = V_\beta = V, \qquad G_0^{(+)} = G_0^{(-)\dagger} = [E - H_0 + i\varepsilon]^{-1}$$

と置く．すでに学んだように，

$$|\Phi_a\rangle = (1 - G_0^{(+)}V)|\Psi_a^{(+)}\rangle, \qquad \langle\Phi_b| = \langle\Psi_b^{(-)}|(1 - VG_0^{(+)}).$$

振幅 $T_{a\to b}$ はまたつぎの式によっても与えられる：

$$T_{a\to b} = \frac{\langle\Psi_b^{(-)}|V|\Phi_a\rangle\langle\Phi_b|V|\Psi_a^{(+)}\rangle}{\langle\Psi_b^{(-)}|(V - VG_0^{(+)}V)|\Psi_a^{(+)}\rangle}. \tag{178}$$

この表示式は関数 $\Psi_a^{(+)}$ と $\Psi_b^{(-)}$ の独立な変分に対して停留値をとる．これは §27 で与えられた T_l の停留表示の一般化である．

二つの素粒子の衝突のように，ごく簡単な場合を除くと，この表示式を実際に利用するときには，いっそう大きな困難に出会う．すなわち，グリーン関数 $G_0^{(+)}$ を具体的につくるのがむずかしい．しかし，$G_0^{(+)}$ の具体的な形を知らなくてもすむような理論では，ときにこれが利用される [22]．結論として，この応用はかなり限定されている．

V. 遷移行列の一般的性質

T 行列のいくつかの性質は，衝突を支配するハミルトニアンの特性から直接に出てくる．それらについては，前の数節でも機会があるごとに注意したが，それらのもつきわめて一般的な性格を強調することはなかった．本節ではこの問題をもう一度系統的に取りあげる．

§30. 流束の保存．S 行列

T 行列のいくつかの性質は，衝突を支配するハミルトニアン H のエルミート性から簡単に導かれる結果である．たとえば §19 で得た積分表示 (121) と (122) がそれである．同じ方法を使って，われわれはさらに二つの新しい関係を導き，それらを《流束保存の関係》と名づけよう．

もう一度 §19 の記号を使って，同じエネルギーの値 E に対応する二つの定常波 $\Psi_a^{(+)}$，$\Psi_b^{(+)}$ を考える．これらについては

$$\Psi_b^{(+)*}(H\Psi_a^{(+)}) - (H\Psi_b^{(+)})^*\Psi_a^{(+)} = 0$$

が成り立つ．それゆえ，左辺をスピンについて加え，配置空間の有限な体積部分において積分しても，得られる結果は 0 である．その量にグリーンの定理を適用すれば面積分に変形され，この曲面を無限遠に近づける極限において，面積分はいろいろな開いたチャンネルに関する項の和の形に書き表わされる（注 [17] を参照）．こうして

---

[22] B. LIPPMANN と J. SCHWINGER の前掲論文 (107 頁) を見よ．

$$0=\sum_{\nu}\frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\{\Psi_b^{(+)*},\Psi_a^{(+)}\}_\nu \tag{179}$$

が得られる．この式の右辺を (119) の右辺とくらべるがよい．これを計算するため，各チャンネルごとに関数 $\Psi_b^{(+)}$, $\Psi_a^{(+)}$ をそれらの漸近式に置き換える．その結果は，

$$0=\frac{\hbar^2}{2M_\beta}\lim_{R_\beta\to 0}\left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_b\cdot\boldsymbol{r}_\beta},f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_\beta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_b r_\beta}}{r_\beta}\right\}_\beta+\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\lim_{R_\alpha\to 0}\left\{f_{b\alpha}^{(+)*}(\Omega_\alpha)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_a r_a}}{r_\alpha},\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_a\cdot\boldsymbol{r}_a}\right\}_\alpha$$
$$+\sum_\nu\frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to 0}\left\{f_{b\nu}^{(+)*}(\Omega_\nu)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_n r_\nu}}{r_\nu},f_{a\nu}^{(+)}(\Omega_\nu)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_n r_\nu}}{r_\nu}\right\}_\nu.$$

初めの二つの項の寄与を計算するには，§2 でなされた計算の筋道をたどる．第3項はすべてのチャンネルについての和であり，このなかにはチャンネル α とチャンネル β も含まれる．記号 $\{\cdots\}_\nu$ の定義を思い出せば，これは容易に計算される．§19 の計算で生じた事情とは反対に，この項の寄与は 0 にならない．計算をすませた結果は，

$$0=-\frac{2\pi\hbar^2}{M_\beta}f_{a\beta}^{(+)}(\Omega_b)+\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha}f_{b\alpha}^{(+)*}(\Omega_a)+\sum_\nu\frac{\mathrm{i}\hbar^2k_n}{M_\nu}\int f_{b\nu}^{(+)*}(\Omega_\nu)f_{a\nu}^{(+)}(\Omega_\nu)\mathrm{d}\Omega_\nu$$

となる．この式のなかの $f(\Omega)$ を定義 (114) による T の行列要素に置き換えれば，

$$0=\langle b|T|a\rangle-\langle b|T^\dagger|a\rangle+2\pi\mathrm{i}\sum_\nu\rho_\nu(E)\int\langle b|T^\dagger|n\rangle\mathrm{d}\Omega_\nu\langle n|T|a\rangle \tag{180}$$

を得る．われわれは n によって，Ω_ν 方向を向いたチャンネル ν の平面波を表わし，状態の密度の定義

$$\rho_\nu(E)=M_\nu k_n/(2\pi)^3\hbar^2$$

を用いた．他方，$T^\dagger$ はエルミート共役に関する普通の定義

$$\langle m|T^\dagger|n\rangle=\langle n|T|m\rangle^*$$

によって与えられる．

上に述べた取り扱いは，波 $\Psi^{(+)}$ を波 $\Psi^{(-)}$ に換えても同じようになされる．たとえば，関係

$$0=\sum_\nu\frac{\hbar^2}{2M_\nu}\lim_{R_\nu\to\infty}\{\Psi_a^{(-)},\Psi_b^{(-)*}\}_\nu \tag{179'}$$

を得るが，これは (179) の a と b を取り替え，$\Psi^{(+)}$ を $\Psi^{(-)}$ に換えることによって導き出される．この右辺の値を求めるには，さきほどの計算をたどりながら必要な置き換えを行ない，T の行列要素としては定義 (114) の代りに (114′) を使えばよい．結果は

$$0=\langle b|T|a\rangle-\langle b|T^\dagger|a\rangle+2\pi\mathrm{i}\sum_\nu\rho_\nu(E)\int\langle b|T|n\rangle\mathrm{d}\Omega_\nu\langle n|T^\dagger|a\rangle. \tag{180'}$$

関係 (180) と (180′) の別証明を与えよう．これはもっと形式的である．二つの関係式

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b|V_\beta|\Phi_a\rangle + \langle \Phi_b|V_\beta \frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon} V_\alpha|\Phi_a\rangle$$

$$\langle b|T^\dagger|a\rangle = \langle \Phi_b|V_\alpha|\Phi_a\rangle + \langle \Phi_b|V_\beta \frac{1}{E-H-\mathrm{i}\varepsilon} V_\alpha|\Phi_a\rangle$$

から，辺ごとに差をとり，性質(124) および付録 A の (15c) を適用すれば，

$$\langle b|T-T^\dagger|a\rangle = -2\pi\mathrm{i}\langle \Phi_b|V_\beta\,\delta(E-H)\,V_\alpha|\Phi_a\rangle \tag{181}$$

を得る．H のスペクトルの全体にわたって定常波 $\Psi_n^{(-)}$——とびとびのスペクトルがあれば，その固有ベクトルの完全列を適当に規格化して付け加える——をとると，これらの全体が H の固有ベクトルの完全直交系をつくるとし，またしたがって完全性関係

$$(2\pi)^{-3}\sum_n |\Psi_n^{(-)}\rangle\langle\Psi_n^{(-)}| = 1 \tag{182}$$

が成り立つとする［この和は H のスペクトルの全体，とびとびのスペクトルをも含めた全体にわたってとる］．同様に $\Psi_n^{(+)}$ の全体が完全性関係

$$(2\pi)^{-3}\sum_n |\Psi_n^{(+)}\rangle\langle\Psi_n^{(+)}| = 1 \tag{182'}$$

を満たすことも承認する．(182) を使えば，(181) の右辺の内積を

$$\begin{aligned}\langle \Phi_b|V_\beta\,\delta(E-H)\,V_\alpha|\Phi_a\rangle &\equiv (2\pi)^{-3}\sum_n \langle \Phi_b|V_\beta|\Psi_n^{(-)}\rangle\,\delta(E-E_n)\langle\Psi_n^{(-)}|V_\alpha|\Phi_a\rangle \\ &= \sum_\nu \rho_\nu(E)\int \langle b|T^\dagger|n\rangle\,\mathrm{d}\Omega_\nu\langle n|T|a\rangle\end{aligned}$$

という形に書き表わすことができ (*)，これから (180) が導かれる．(182′) を使えば，同じようにして (180′) が得られる．

T と $T^\dagger$ の行列要素に関する等式 (180) と (180′) は，どのような a と b に対しても成り立つ．これらはもっと簡単な形に書き表わされる．すなわち

$$T-T^\dagger+2\pi\mathrm{i}\,T^\dagger T = 0 \tag{183}$$

$$T-T^\dagger+2\pi\mathrm{i}\,TT^\dagger = 0. \tag{183'}$$

ただし行列の積 $T^\dagger T$ と $TT^\dagger$ においては，黙り添字に関する和に一つの規約を付け加える．すなわち，各添字 ν に重み $\rho_\nu(E)$ をつけることにする．これはチャンネル ν にある状態の密度を与える因子である．ここに入ってくる行列の要素は，すべてエネルギー E をもつ状態のあいだでとられたものである．このことをはっきりさせておく．

ここで S 行列をつぎのように導入する．

$$S \equiv 1-2\pi\mathrm{i}\,T. \tag{184}$$

この行列はエネルギー E の衝突を特徴づけるものであり，その要素は T の要素と同様エネルギー E の状態のあいだに定められる．T と $T^\dagger$ をそれぞれ S と $S^\dagger$ の式で表わし，(180) と (180′) に代入すれば，

(*) ［訳注］ (121) と (122) を参照．

$$S^\dagger S = SS^\dagger = 1 \tag{185}$$

を得る．すなわち S 行列はユニタリである．

さらに，$U(t,t')$ をこの系の時間的変化の演算子とすれば，

$$S = \lim_{\substack{t\to+\infty \\ t'\to-\infty}} U(t,t')$$

であることが示される．これを証明するときには，極限移行の吟味をきわめて慎重に行なわなければならない．ここでは証明を省く（107 頁の注 (1) の文献を参照）．

§31. ボーア＝パイエルス＝プラチェックの関係

$a=b$ となる特別な場合に関係 (180) を調べる［注意；$a=b$ のとき関係 (180) と (180′) は同値である］．このとき

$$\langle a|T|a\rangle - \langle a|T|a\rangle^* = -2\pi\mathrm{i}\sum_\nu \int |\langle n|T|a\rangle|^2 \rho_\nu(E)\,\mathrm{d}\Omega_\nu. \tag{186}$$

右辺の積分記号のなかに，断面積 $\mathrm{d}\sigma_{a\to n}/\mathrm{d}\Omega_\nu$ を表わす式が（因数 $2\pi/\hbar v_a$ を除いて）現われているのに気がつく．したがって

$$\sum_\nu \int |\langle n|T|a\rangle|^2 \rho_\nu(E)\,\mathrm{d}\Omega_\nu = \frac{\hbar v_a}{2\pi}\sum_\nu \int \frac{\mathrm{d}\sigma_{a\to n}}{\mathrm{d}\Omega_\nu}\mathrm{d}\Omega_\nu = \frac{\hbar v_a}{2\pi}\sigma_a^{\mathrm{tot.}}.$$

$\sigma_a^{\mathrm{tot.}}$ は始状態 a の衝突の全断面積を表わす．この結果を (186) の右辺に入れれば，

$$\sigma_a^{\mathrm{tot.}} = -\frac{2}{\hbar v_a}\,\mathrm{Im}\,T_{aa}$$

が得られる．この関係をもっと親しみやすい形に書くために，T_{aa} を前向きの散乱振幅 $f_{a\alpha}^{(+)}(\Omega_a)$ の関数として表わす（式 (114) を参照）．$f_{a\alpha}^{(+)}(\Omega_a)$ を単に $f_a(0)$ と書けば，

$$T_{aa} \equiv \langle a|T|a\rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{M_\alpha}f_a(0),$$

したがって

$$\boxed{\sigma_a^{\mathrm{tot.}} = \frac{4\pi}{k_a}\,\mathrm{Im}\,f_a(0)} \tag{187}$$

となる．これはボーア＝パイエルス＝プラチェックの公式であって，全断面積を前向きの散乱振幅の虚部に結びつけるものである．

§32. 微視的可逆性

H が時間反転により不変であるときには，T 行列が微視的可逆性の関係を満たす（第15章，§20を参照）．すなわち

$$\boxed{T_{Kb\to Ka}=T_{a\to b}.} \tag{188}$$

実のポテンシャルによる1粒子の散乱という簡単な場合には，すでにこの関係が証明されている（§3と14）．§14の形式的な証明は一般の場合にも大きな修正をせずに繰り返される．K を時間反転の演算子とし，状態 a，b から時間反転（運動量とスピンの向きを逆にすること）によって導かれる始状態あるいは終状態をそれぞれ Ka，Kb によって表わす．もっと正確に言えば，

$$\Phi_{Kb}\equiv K\Phi_b,\qquad \Phi_{Ka}\equiv K\Phi_a.$$

性質（188）を証明するために，任意の遷移の振幅を表わす式（142）を使う．すなわち

$$T_{Kb\to Ka}=\langle\Phi_{Ka}|\left[V_\alpha+V_\alpha\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V_\beta\right]|\Phi_{Kb}\rangle$$

$$=(\langle\Phi_a|K^\dagger)\left[V_\alpha+V_\alpha\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V_\beta\right](K|\Phi_b\rangle).$$

K は反ユニタリで，H，V_α，V_β は時間反転により不変であるから，

$$T_{Kb\to Ka}=\langle\Phi_b|\left[V_\alpha+V_\beta\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V_\alpha\right]|\Phi_a\rangle$$

$$=\langle\Phi_b|\left[V_\beta+V_\beta\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}V_\alpha\right]|\Phi_a\rangle.$$

2行目の式は（124）を使って得られる．これは振幅 $T_{a\to b}$ を表わす式（142）である．

（証明終）

（188）の両辺を二乗し，それぞれ断面積 $\mathrm{d}\sigma_{a\to b}/\mathrm{d}\Omega_\beta$，$\mathrm{d}\sigma_{Kb\to Ka}/\mathrm{d}\Omega_\alpha$ を使って書き直せば，断面積の微視的可逆性の関係

$$\frac{v_b\,\mathrm{d}\sigma_{Kb\to Ka}}{\rho_a(E)\,\mathrm{d}\Omega_\alpha}=\frac{v_a\,\mathrm{d}\sigma_{a\to b}}{\rho_b(E)\,\mathrm{d}\Omega_\beta} \tag{189}$$

を得る．実際，$v_{Kb}=v_b$，$\rho_{Ka}=\rho_a$ が成り立つからである．さらに，速度の定義と状態の密度の定義（第17章（52））を思い出せば，各チャンネルごとに

$$v_n\rho_n=\frac{p_n^2}{(2\pi\hbar)^3}=\frac{k_n^2}{(2\pi)^3\hbar}$$

が成り立つ．したがって（189）はまた

$$\boxed{k_b^2\,\mathrm{d}\sigma_{Kb\to Ka}=k_a^2\,\mathrm{d}\sigma_{a\to b}} \tag{190}$$

と書かれる．ただしここでは $\mathrm{d}\Omega_\alpha=\mathrm{d}\Omega_\beta=\mathrm{d}\Omega$ と規約した．

§33.　T 行列の不変性

今度は，H が回転や反転あるいはもっと一般に，ユニタリ演算子によって表わされる変換に関して不変であるとき，それから生じる結果を調べる．われわれはまず一つの変換を，ついで一つの決まった変換群を考え，これらに関する不変性から生じる結果を順に調べる．

与えられたユニタリ変換 X によって H, H_α, H_β が不変であるとき，

$$T_{Xa\to Xb} = T_{a\to b} \tag{191}$$

という関係が成り立つ（第15章，§13を参照）．［注意；この関係と微視的可逆性の関係とをくらべると，左辺の振幅に対する反応の向きが違う］．

これを証明するには，定義（144）から，演算子 $T^{\beta\alpha}$ もまた変換 X によって不変であることを見ればよい．すなわち

$$X^\dagger T^{\beta\alpha} X = T^{\beta\alpha}.$$

したがって

$$T_{Xa\to Xb} \equiv \langle \Phi_b | X^\dagger T^{\beta\alpha} X | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | T^{\beta\alpha} | \Phi_a \rangle \equiv T_{a\to b}.$$

（191）から，断面積のあいだの関係が容易に導かれる．すなわち

$$\mathrm{d}\sigma_{Xa\to Xb} = \mathrm{d}\sigma_{a\to b}. \tag{192}$$

これを（190）とくらべてみるがよい．

今度は全ハミルトニアン H も《摂動のない》いろいろなハミルトニアン $H_\alpha, H_\beta, \cdots$ も，ある群 G に属する変換に関して不変であるとする．このことから，G に関して不変なオブザーバブルを表わす行列に対し，第15章 §11 で得られた諸結果と類似の結果が，T 行列に対しても導き出される．

そのために，第15章 §11 の記号をもう一度使って，そこで定義されたオブザーバブルの集合 J と集合 M を考える．エネルギー E をもつ衝突に対して開いたチャンネルの一つを ν とする．H_ν, J および M は交換するオブザーバブルの集合をつくる．これらに共通な一つの基底系に属するベクトルを $|\nu E_\nu \tau_\nu j \mu\rangle$ で表わす（これが群 G に対して採用される標準基底系であると規約して動かさないことにするが，この制限は本質的なものではない）．添字 ν は考えているチャンネルを示し，E_ν は H_ν の固有値であり，j と μ はそれぞれオブザーバブル J と M の固有値を表わし，τ_ν はこれらに付け加えられる量子数で，その変域は E_ν, j, μ の値によって定められる．これらのベクトルは直交規格化されている．すなわち

$$\langle \nu E_\nu \tau_\nu j \mu | \nu E'_\nu \tau'_\nu j' \mu' \rangle = \delta(E_\nu - E'_\nu)\delta_{\tau_\nu \tau'_\nu}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}.$$

話を簡単にするため，添字 τ_ν はとびとびであると仮定した．このことは，群 G または

それに含まれる部分群が回転を表わす群であり，このチャンネルがエネルギー E_ν をもつ2粒子しか含まない場合に起こる．このとき τ_ν は有限個のとびとびの値をとりうる．

ここで，衝突のエネルギー E を一つ決めて動かさないことにし，あるチャンネル ν から別のチャンネル ν' への遷移を考える．さきに仮定したことから，対応する演算子 $T^{\nu\nu'}$ (定義 (144)) は群 G の変換に関して不変である．第15章の性質 (52) の自明な一般化により，このことから

$$\langle \nu E \tau_\nu j \mu | T^{\nu\nu'} | \nu' E \tau_{\nu'} j' \mu' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} \langle \nu \tau_\nu | T^{(j)} | \nu' \tau_{\nu'} \rangle \tag{193}$$

が導き出され，$\langle \nu \tau_\nu | T^{(j)} | \nu' \tau_{\nu'} \rangle$ は量子数 j, τ_ν, $\tau_{\nu'}$ に依存するが，μ には無関係である．(193) によって，群 G に関する不変性から生じる結果がすべて要約される．

開いたチャンネルの組 (ν, ν') の一つ一つに対して，このようにいくつかの係数 $\langle \nu \tau_\nu | T^{(j)} | \nu' \tau_{\nu'} \rangle$ が定まる．これらの係数のうち，与えられた j の値に対応するもの (j と E は固定；ν, τ_ν, ν', $\tau_{\nu'}$ は変数) の全体は一つの正方行列をつくる．これを $T^{(j)}$ で表わす．この行列は T 行列に似ているが，一般にその次元数ははるかに小さい．特に，G が回転を表わす群を含み，開いたチャンネルがいずれも二つより多くの粒子を含まないとき，$T^{(j)}$ は有限行列である．さらに，開いたチャンネルがただ一つしかなく，その二つの粒子がスピン0をもつとき，$T^{(j)}$ は1次元しかもたない．これは単なる数で，一つの因数——これを決めるのはやさしい——を除けば，展開 (51) によって定められた係数 T_j に等しい．

遷移 $T_{a\to b}$ の振幅を $T^{(j)}$ 行列の要素の級数に展開するのは容易である．そのためには，定義 (145) から出発し，チャンネル α と β に対する標準基底の完全性関係を使ってこれを変形し，さらに (193) を利用する．この展開の係数は，上記の基底ベクトルに対する平面波 Φ_a, Φ_b の射影によって決まる．チャンネル ν においてエネルギー E をもつ平面波を Φ_n で表わせば，

$$\langle \Phi_n | \nu E_\nu \tau_\nu j \mu \rangle = \delta(E - E_\nu) \langle \Phi_n | \nu \tau_\nu j \mu \rangle \tag{194}$$

と書くことができる．この記号を使えば，簡単な計算によって，つぎの式が得られる：

$$T_{a\to b} = \sum_{j\mu} \sum_{\tau_\alpha \tau_\beta} \langle \Phi_b | \beta \tau_\beta j \mu \rangle \langle \beta \tau_\beta | T^{(j)} | \alpha \tau_\alpha \rangle \langle \alpha \tau_\alpha j \mu | \Phi_a \rangle. \tag{195}$$

この展開は展開 (51) の一般化であり，(51) と同様に，収束が速いときには特に有効である．通常このことが起こるのは，核の衝突の場合，入口のチャンネルまたは出口のチャンネルの波長が核力の有効距離にくらべてはるかに大きいときであり，また利用される機会が最も多いのもこの場合である (注 ([14]) の文献を参照)．

演習と問題

1. 漸近的性質

$$\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{2\pi}{\mathrm{i}qr}[\delta(\Omega_r-\Omega_q)\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr}-\delta(\Omega_r+\Omega_q)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qr}]+O\left(\frac{1}{r^2}\right)$$

を証明したい．そのために，

i) 球面調和関数による平面波の展開と，球面調和関数の完全性関係を利用せよ．

ii)
$$\int \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\varphi(\Omega_r)\mathrm{d}\Omega_r$$

の漸近式を直接に求めよ [$\varphi(\Omega)$ は方向 $\Omega\equiv(\theta\varphi)$ の連続関数；Ω_r と Ω_q はそれぞれベクトル $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{q}$ の方向]．

2. 二つの平面波 $\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{r})$，$\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{r})$ が同じ波長をもつ ($q_1=q_2$) とき，任意の R に対して

$$\{\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{r}),\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{r})\}=0$$

が厳密に成り立つ．このことを証明せよ [$\{\cdots\}$ の定義は §2 にあるもの]．

3. ボルン近似によって，つぎのポテンシャルに対する散乱断面積を計算せよ．

i) 深さ V_0 と半径 a をもつ球形の井戸型ポテンシャル．

ii) ガウス・ポテンシャル

$$V=V_0\exp(-r^2/a^2).$$

iii) 湯川ポテンシャル

$$V=\frac{V_0\exp(-Kr)}{Kr}.$$

高エネルギーにおいて，方向に関する分布がどのような一般的挙動を示すかは，§4 に述べた．上記三つの特殊な場合について，このことを確かめよ．全断面積の漸近式を求めよ．

4. 短い有効距離をもつ中心力ポテンシャル $V(r)$ ($r\to\infty$ のとき $rV\to 0$) のなかにある質量 m の粒子のハミルトニアン

$$H\equiv-(\hbar^2/2m)\triangle+V(r)$$

を考える．エネルギー $E=\hbar^2k^2/2m$ に対して，l 位の動径方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2m}{\hbar^2}V+k^2\right]y_l=0$$

と書き表わされる．これの正則な解を $F_l(k;r)$，《出てゆく》解と《入ってくる》解をそれぞれ $u_l^{(+)}(k;r)$ と $u_l^{(-)}(k;r)$ で表わす．これらの解の規格化は，

$$F_l(k;r)\underset{r\to\infty}{\sim}\sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l\right),\qquad u_l^{(\pm)}(k;r)\underset{r\to\infty}{\sim}\exp\left[\pm\mathrm{i}\left(kr-\frac{1}{2}l\pi\right)\right]$$

となるように定める.

i) 定常波 $\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}$ (§2 の定義) はそれぞれ展開

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)} = \frac{4\pi}{kr}\sum_{lm} \mathrm{i}^l \exp(\pm \mathrm{i}\delta_l)\, Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) F_l(k\,;\, r)$$

によって表わされることを示せ.

ii) $$\frac{\hbar^2}{2m} G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{1}{krr'}\sum_{lm} \exp(\pm \mathrm{i}\delta_l)\, Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}})\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}') F_l(k\,;\, r_<) u_l^{(\pm)}(k\,;\, r_>)$$

によって定められる関数 $G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ は，演算子 $E-H$ のグリーン関数，すなわち $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ について対称で，方程式

$$(E-H)G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

を満たす関数である．またこれらの漸近的な挙動はそれぞれ

$$G^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\exp(\pm\, \mathrm{i}kr)}{r}\,\phi_{\pm\boldsymbol{k}}^{(\mp)}(\boldsymbol{r}') \qquad (\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{r}/r)$$

である．以上のことを示せ.

[V の漸近的挙動が $1/r$ のようなときでも，F_l と $u_l^{(\pm)}$ の定義に適当な修正を施せば，これらの公式が同じように適用される；その結果として，$G^{(\pm)}$ の漸近式にも修正を加える必要が生じる].

5. 公式 (151) を証明せよ.

わたしは黒いけれども美しい.

《雅歌》 I, 5

第 5 部

相対論的量子力学入門

《雅歌》は旧約聖書の一部

第20章　ディラック方程式

I．一般的な序説

§1.　相対論的量子力学 (1)

これまでに学んできた応用はすべてシュレーディンガー方程式に基礎を置いている．この方程式は，非相対論的古典力学におけるハミルトニアンの形式から対応原理によって導き出されたものであり，その根拠をつくっているハミルトニアンの不変性をすべて保っている．特に系が孤立しているときには，空間の回転と並進に関してこの方程式は不変である．それはまたガリレイ変換に関しても不変であることが示される（第15章，問題7を参照）．したがって，シュレーディンガーの理論から予見される物理的性質は，座標系のガリレイ変換に対して不変であるが，相対性原理が要求するような座標系のローレンツ変換に関する不変性をもたない．ガリレイ変換がローレンツ変換と同一視されるのは，速さが小さい極限の場合だけであるから，問題になっている粒子の速さが光速に対して無視される場合，すなわち $v \ll c$ の場合を除けば，この理論は現象を正確に記述しないことが予想され，これは実験によっても確かめられている．特に，光と物質のあいだの相互作用に関する現象，すなわち光子の放出，吸収，散乱のような現象は，非相対論的量子力学の枠から出てしまう．

相対論的量子論をつくり上げるときに生じる主な困難の一つは，粒子数保存の法則（第2章，§9）が一般に成り立たなくなることからくる．実際，相対性原理の最も重要な結果の一つとして，質量とエネルギーのあいだの同値性が知られている．この性質はつぎのような形で現われる．すなわち，相互作用によって粒子の静止状態におけるエネルギーに等しいか，またはこれより大きいエネルギーの移行がひき起こされたときはいつでも，これらの粒子が生成されたり吸収されたりする可能性が生じる．それゆえ，相対論的量子論が完全なものであるためには，量子状態を異にする力学的状態だけでなく，それを構成する素粒子の性質や個数を異にする状態までも，同じ一つの枠のなかに統一しなければならない．そのためには，量子化された場という概念に訴える必要がある．ここから場の量子

(1)　この章を読むためには，（第2巻の）付録Dの第I節と第II節に通じていることが望ましい．

論という名が生まれ，普通は相対論的量子論をこのように呼んでいる．現在行なわれている形では，この理論には難点があるばかりでなく，矛盾さえ含まれている．しかしこれによって驚くほど多くの実験的事実が説明されている．

この本の第5部すなわち最後の部分は，電子の力学や電磁場と荷電粒子の相互作用に関するいくつかの相対論的効果について初等的な計算法を示しながら，場の量子論に対する入門として役立つように予定されている．

全体は2章から成る．

本章すなわち初めの章は，相対論的量子力学の諸問題のうちで最も簡単なものの一つ，すなわち与えられた力の場のなかにあるスピン1/2の1粒子の問題に当てられる．その典型的な場合は，電磁場のなかの1粒子の問題である．場は量子化されず，相対性原理が要求するとおりの不変性をもつ波動方程式によって，この系の変化を記述することが求められる．さらにこの方程式は非相対論近似において対応原理を満たし，パウリの理論による方程式を与えなければならない．このような方程式は存在する．すなわちディラック方程式である．ローレンツ群と相対論的古典力学についていくらか復習してから（第I節），ディラック方程式をつくり（第II節），つぎにその不変性に関する詳しい研究を行なう（第III節）．本章の残りの部分では，この理論の意味をもっと深く掘り下げ，主な応用を吟味しながら，この理論が古典力学に対して（第IV章），非相対論的量子論に対して（第V章），また場の量子論に対して（第VI章）どのように位置づけられるかを調べる．

二番目の章は量子化された場の概念，電磁輻射の初等的量子論，電磁輻射と原子系または核系との相互作用に関する量子論に当てられる．

§2.　いろいろな記号，規約および定義

単　　位

読んでゆけばおのずから明らかな例外をいくつか除けば，今後現われる式はいずれも，

$$\hbar = c = 1$$

と置いて書き表わされる．このように特別な単位を選べば，時間は見掛け上長さのディメンションをもち，エネルギー，運動量および質量は長さの逆数のディメンションをもつ．電子の電荷はディメンションをもたない量として表わされる（$e^2 \equiv e^2/\hbar c \simeq 1/137$）．また，同次性について簡単な考慮を払えば，一般の式に書き直すのも容易である．

座　　標

時刻 t と普通の空間の点 $\boldsymbol{r} \equiv (x, y, z)$ を与えると，時空間（espace-temps）の一点が定められる．後者の座標をそれぞれ x^0，x^1，x^2，x^3 で表わす．$x^0 \equiv ct$ は時間の座標で

あり，x^1，x^2，x^3 は空間の三つの座標，すなわち $x^1 \equiv x$，$x^2 \equiv y$，$x^3 \equiv z$ である．もっと一般に，４元ベクトルまたはテンソルの t，x，y，z 軸方向の成分を表わすのに，それぞれ添字０，１，２，３を用いる．ギリシア文字が添字として用いられるときは，時空間の４元ベクトルまたはテンソルの成分を表わし，四つの値０，１，２，３を取りうるものとする．ローマ字は普通の空間における成分を表わすためにとっておく．これは三つの値１，２，３をとりうる．たとえば，

$$x^\mu \equiv (x^0, x^k) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) \qquad (\mu = 0, 1, 2, 3\,;\ k = 1, 2, 3).$$

計量テンソル．共変添字と反変添字

時空間の計量は擬ユークリッド計量 (métrique pseudo-euclidienne) で，計量テンソル

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

すなわち

$$g_{00} = 1, \qquad g_{kk} = -1, \qquad \mu \neq \nu \text{ のとき } g_{\mu\nu} = 0 \tag{1}$$

によって定められる．

($\partial/\partial x^\mu$ のように変換される) 共変ベクトルと，(x^μ のように変換される) 反変ベクトルのあいだの区別，もっと一般にテンソルの共変成分と反変成分とのあいだの区別を設けるとつごうがよい．習慣どおり，共変〔成分を表わす〕添字は下につけ，反変〔成分を表わす〕添字は上につける．たとえば a^μ は反変ベクトルを表わす．これに対応する共変ベクトル a_μ は，計量テンソルを使って a^μ からつぎのように導かれる：

$$a_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} a^\nu.$$

したがって

$$a_0 = a^0, \qquad a_k = -a^k.$$

今後は２度現われる添字について和をとる規約をつねに採用する．この規約により，上の関係はもっと簡単に，つぎのように書き表わされる：

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu.$$

同じように，添字を上げる操作はテンソル $g^{\mu\nu}$ を使って行なわれる．すなわち

$$a^\mu = g^{\mu\nu} a_\nu.$$

今の場合には

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$$

である．他方

$$g_\mu{}^\nu = g_{\mu\rho} g^{\rho\nu} = g^\mu{}_\nu = \delta_\mu{}^\nu$$

が成り立ち，$\delta_\mu{}^\nu$ はクロネッカーの δ 記号

$$\delta_\mu{}^\nu = \begin{cases} 1 & (\mu = \nu \text{ のとき}) \\ 0 & (\mu \neq \nu \text{ のとき}) \end{cases}$$

である (*).

3元ベクトル．4元ベクトル．内積

3元ベクトルすなわち普通の空間のベクトルについては，今までどおりの記号を使う．各ベクトルは太い文字で表わされ，その長さは対応する細い文字で表わされる．

反変4元ベクトル a^μ の三つの空間成分は3元ベクトルをつくる．それゆえ上に定めた記法によれば，

$$a^\mu \equiv (a^0, a^1, a^2, a^3) \equiv (a^0, \boldsymbol{a}), \qquad \boldsymbol{a} = (a_x, a_y, a_z),$$

$$a^1 = a_x, \qquad a^2 = a_y, \qquad a^3 = a_z, \qquad a = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a})^{1/2} \equiv [a_x^2 + a_y^2 + a_z^2]^{1/2}$$

となる．3元ベクトル $\boldsymbol{a}$ の長さとのあいだに混乱を生じる可能性がないときには，場合により4元ベクトル a^μ の添字を省き，単に a で表わす．

二つの4元ベクトル a^μ，b^μ の内積は，一方の反変成分と他方の共変成分とを縮約 (**) することによって得られる．すなわち $a_\mu b^\mu$ または $a^\mu b_\mu$ である．これについては

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = a^0 b^0 - \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} \tag{2}$$

が成り立つ．a^μ のノルムは $a_\mu a^\mu = (a^0)^2 - \boldsymbol{a}^2$ である．

4元ベクトルの分類

4元ベクトルはノルムの符号により三つの型 (genre) に分けられる．すなわち

$a_\mu a^\mu < 0$ のとき　　a^μ = 空間型ベクトル

$a_\mu a^\mu = 0$ のとき　　a^μ = 0型ベクトル

$a_\mu a^\mu > 0$ のとき　　a^μ = 時間型ベクトル．

この分類は，光円錐 $x_\mu x^\mu = 0$ に対するベクトル a^μ の位置に応じて行なわれている．あとの二つの場合は時間成分の符号によりさらに二つの種類に区別される．すなわち，

(*) ［訳注］ 時空間の基底系を変換すれば，$g_{\mu\nu}$ は必ずしも (1) の形をとらない．一般に行列 $g_{\mu\nu}$ は固有値 1，-1，-1，-1 をもつ対称行列であり，$g^{\mu\nu}$ はその逆行列として定められる．これらはいずれも計量テンソルの成分である．同様に，a^μ と a_μ は同じベクトルの反変成分および共変成分と考えられる．

(**) ［訳注］ 反変添字と共変添字をもつテンソル，たとえば $t^\lambda{}_{\mu\nu}$ から，$t_\nu = t^\mu{}_{\mu\nu} = \sum_{\mu=1}^{4} t^\mu{}_{\mu\nu}$ をつくる手続きを縮約という．縮約によってテンソルの階数は2階だけ下がる．2階のテンソル $a^\mu b_\nu$ の縮約によって内積

$$g_{\mu\nu} a^\mu b^\nu = a_\nu b^\nu = a^\mu b_\mu$$

が求められる．

$a^0>0$ のときは未来を指すベクトル

$a^0<0$ のときは過去を指すベクトル.

グラディエント. 微分演算子

記号 $\nabla\equiv(\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ と $\Delta\equiv\nabla\cdot\nabla$ はもとのまま使う.

四つの偏微分演算子 $\partial/\partial x^\mu$ は一つの共変ベクトルをつくる. これを記号 ∂_μ で表わす. すなわち

$$\partial_\mu\equiv\frac{\partial}{\partial x^\mu}\equiv\left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right)\equiv\left(\frac{\partial}{\partial ct}, \nabla\right). \tag{3}$$

これがグラディエント演算子である.

つぎの《反変グラディエント》

$$\partial^\mu\equiv g^{\mu\nu}\partial_\nu\equiv\left(\frac{\partial}{\partial ct}, -\nabla\right) \tag{4}$$

もまた用いられる.

ダランベール演算子 □ は

$$\Box\equiv\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\Delta\equiv\partial_\mu\partial^\mu \tag{5}$$

によって定義される (第2章, §12を参照)(2).

テンソル $\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$

$\varepsilon^{\lambda\mu\nu\rho}$ で表わされる4階のテンソルは完全に反対称的であって, その成分は, 二つの添字が等しいとき0, $(\lambda\mu\nu\rho)$ が $(0,1,2,3)$ の偶順列であるとき $+1$, $(\lambda\mu\nu\rho)$ が $(0,1,2,3)$ の奇順列であるとき -1 に等しいとする.

電 磁 場

電磁ポテンシャルはベクトル・ポテンシャルの項 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ とスカラー・ポテンシャルの項 $\varphi(\boldsymbol{r},t)$ から成り, あわせて一つの4元ベクトルをつくる. これを

$$A^\mu\equiv(\varphi, \boldsymbol{A}). \tag{6}$$

で表わす.

電場 $\mathcal{E}$ と磁場 $\mathcal{H}$ は,

$$\mathcal{E}=-\nabla\varphi-\partial\boldsymbol{A}/\partial x^0, \qquad \mathcal{H}=\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \tag{7}$$

によって与えられる.

$\mathcal{E}$ および $\mathcal{H}$ の成分は時空間の反対称テンソル $F_{\mu\nu}$ をつくる. すなわち

$$F_{\mu\nu}=\frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu}-\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu} \tag{8}$$

---

(2) 多くの著書では同じ演算子の符号を変えたものを □ で表わしている.

と定義すれば，

$$F_{\mu\nu} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{E}_x & \mathcal{E}_y & \mathcal{E}_z \\ -\mathcal{E}_x & 0 & -\mathcal{H}_z & \mathcal{H}_y \\ -\mathcal{E}_y & \mathcal{H}_z & 0 & -\mathcal{H}_x \\ -\mathcal{E}_z & -\mathcal{H}_y & \mathcal{H}_x & 0 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

また，

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + ieA_\mu \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x^0} + ie\varphi, \nabla - ie\boldsymbol{A}\right) \tag{10}$$

によって定義される4元ベクトル演算子 D_μ も用いられる．

§3. ローレンツ群

ローレンツの座標変換とは，実の1次式による座標変換のうち，時空間の任意の2点に対して，その間隔のノルムを保存するものをいう．このような変換において，時空間の一点の新座標 x'^μ は旧座標 x^μ から，

$$x'^\mu = \Omega^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu$$

という関係によって導き出される．実のベクトル a^μ は時空間における座標軸の単なる並進を表わす．今後は並進を除いて取り扱い，同次の変換 $(a^\mu = 0)$

$$x'^\mu = \Omega^\mu{}_\nu x^\nu \tag{11}$$

をローレンツ変換と名づけよう (3).

添字の上げ下げにより，行列 $\Omega^\mu{}_\nu$ から行列 $\Omega_\mu{}^\nu$, $\Omega^{\mu\nu}$, $\Omega_{\mu\nu}$ を導き出すことができる（たとえば，$\Omega^{\mu\nu} = g^{\nu\rho}\Omega^\mu{}_\rho$）．これらの行列のうちどれか一つを与えれば，問題になっているローレンツ変換が定められる．実の条件とノルム保存の条件を書き直せば，

$$\Omega^*_{\mu\nu} = \Omega_{\mu\nu} \tag{12}$$

$$\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\lambda} = \Omega_{\nu\mu}\Omega^{\lambda\mu} = \delta_\nu{}^\lambda. \tag{13}$$

したがって

$$\det(\Omega^\mu{}_\nu) = \pm 1 \tag{14}$$

であり，逆変換は

$$x^\mu = x'^\nu \Omega_\nu{}^\mu \tag{15}$$

と書き表わされる．

上に定義した変換の全体は群をつくり，完全ローレンツ群と呼ばれる．すなわち，4元ベクトル間の内積を保存する実線形変換の群である．

$\Omega^{00} > 0$ ならば，この変換によって時間型ベクトルの向き，すなわちこれらのベクトル

(3) 並進をも含めて，ローレンツの座標変換全体からつくられる群を普通は非同次ローレンツ群と呼ぶ．

の時間成分の符号が保たれる．このとき変換は整時 (orthochrone) であると言い，このようなローレンツ変換の全体から成る集合を**整時ローレンツ群**と呼ぶ．

その上さらに $\det(\Omega^{\mu}{}_{\nu}) = +1$ ならば，この変換によって空間の 3 軸がつくる四面体の向きも保たれる．この変換を固有ローレンツ変換という．このような変換の全体は群をつくる．これを**固有ローレンツ群**と呼び，今後は $\mathcal{L}_0$ で表わす．

固有ローレンツ群に属する変換はいずれも無限小変換をつづけて行なった結果とみなされる．**無限小ローレンツ変換**の行列 $\Omega_{\mu\nu}$ は

$$g_{\mu\nu} + \omega_{\mu\nu}$$

という形で，$\omega_{\mu\nu}$ は無限小の量である．条件 (12) と (13) から，

$$\omega_{\mu\nu} = \omega^*_{\mu\nu}, \qquad \omega_{\mu\nu} + \omega_{\nu\mu} = 0 \tag{16}$$

が得られ，したがって $\omega_{\mu\nu}$ は実の反対称テンソルである．

ここでつぎのように置く：

$$Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu} = -Z^{(\beta\alpha)}_{\mu\nu} = g_{\mu\alpha}g_{\nu\beta} - g_{\mu\beta}g_{\nu\alpha}. \tag{17}$$

これは〔μ, ν に関して〕反対称なテンソルであり，0 でない成分は $\mu = \alpha$, $\nu = \beta$ と $\mu = \beta$, $\nu = \alpha$ の二つだけである．そのうちの一つは $+1$，もう一つは -1 に等しい．ε が無限小であるとき，

$$g_{\mu\nu} - \varepsilon Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu}$$

は特殊な無限小ローレンツ変換，すなわち $x^\alpha x^\beta$ 平面における角 ε の《回転》を表わす行列である．

この型の無限小変換は全部で 6 個存在する．x^1x^2, x^2x^3, x^3x^1 平面における《回転》は，それぞれ軸 Oz, Ox, Oy の回りに角 ε だけ空間を回転することであり，x^1x^0, x^2x^0, x^3x^0 平面における《回転》は，それぞれ Ox, Oy, Oz 方向に速度 ε をもつ特殊ローレンツ変換である [4]．

無限小回転のほかに，いろいろな型の反転，特に空間の反転 $s(x'^0 = x^0, x'^k = -x^k)$ と時間の反転 $t(x'^0 = -x^0, x'^k = x^k)$ を定義することができる．整時群は変換 $\mathcal{L}_0$，反

---

(4) Oz のまわりの有限な角 φ の回転によって新座標軸が旧座標軸から導き出されるとき，〔同じ点の座標のあいだに〕

$$x'^1 = x^1\cos\varphi + x^2\sin\varphi, \qquad x'^2 = x^2\cos\varphi - x^1\sin\varphi,$$
$$x'^3 = x^3, \qquad x'^0 = x^0$$

が成り立つ．Ox 方向に速度 $v = \tanh\varphi$ をもつ特殊ローレンツ変換によるときは，

$$x'^1 = x^1\cosh\varphi - x^0\sinh\varphi, \qquad x'^0 = x^0\cosh\varphi - x^1\sinh\varphi,$$
$$x'^2 = x^2, \qquad x'^3 = x^3.$$

上に述べた変換は $\varphi = \varepsilon \equiv$ 無限小 の場合に当たる．

転 s，それらの積 $s\mathcal{L}_0$ から成る．完全群は変換 $\mathcal{L}_0$，$s\mathcal{L}_0$，$t\mathcal{L}_0$，$st\mathcal{L}_0$ から成る．完全群をつくるこれら四つの部分の性質は，つぎの表に要約される：

	$\det(\Omega^\mu{}_\nu)$	Ω^{00}	群の呼び方
$\mathcal{L}_0$	$+1$	>0	固　有
$s\mathcal{L}_0$	-1	>0	整　時
$t\mathcal{L}_0$	-1	<0	完　全
$st\mathcal{L}_0$	$+1$	<0	

§4. 古典相対論力学の復習

電磁場 $(\varphi, \boldsymbol{A})$ のなかにあって，静止質量 m と電荷 e をもつ古典粒子の力学的性質を復習する．

この粒子の速度を $\boldsymbol{v}$ で表わす．すなわち

$$\boldsymbol{v} \equiv \mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t. \tag{18}$$

相対質量 M と狭義の運動量 ([5]) $\boldsymbol{\pi}$ をつぎのように定義する：

$$M \equiv m/\sqrt{1-v^2}, \qquad \boldsymbol{\pi} \equiv M\boldsymbol{v}. \tag{19}$$

$(M, \boldsymbol{\pi})$ は一つの4元ベクトル π^μ であって，そのノルムは m^2，すなわち

$$M^2 - \pi^2 = m^2 \tag{20}$$

であり，未来を指す $(M>0)$．

場がないとき，この粒子は一様な直線運動を行なう．すなわち，$\boldsymbol{v}=$ 定数．

電磁場があるとき，この粒子がたどる軌道は方程式

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\pi}/\mathrm{d}t = e[\boldsymbol{\mathcal{E}} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}] \equiv \boldsymbol{F} \tag{21}$$

を満たす．これが質点の相対論力学の基本方程式である．ベクトル $\boldsymbol{F}$ は**ローレンツ力**と呼ばれる．

方程式 (21) から出る結果のうち，方程式

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} = (\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{F}) = e(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}) \tag{21$'$}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\pi}) = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F} \tag{22}$$

をあげておく．これはそれぞれ質量と狭義の運動量のモーメントの変化の法則を与える．

この粒子の固有時間 τ を導入すれば，上記の関係を共変形式に書き表わすことができ

([5]) 〔三つの座標に対するラグランジュの共役〕運動量と混同しないように（第2章の脚注 ([14]) を参照）．

る．τ は

$$\mathrm{d}\tau = (\mathrm{d}x^\mu \mathrm{d}x_\mu)^{1/2} = \sqrt{1-v^2}\,\mathrm{d}t$$

によって定義される．これにより4元速度

$$u^\mu \equiv \mathrm{d}x^\mu/\mathrm{d}\tau \equiv (\mathrm{d}t/\mathrm{d}\tau, \boldsymbol{v}\,\mathrm{d}t/\mathrm{d}\tau) \qquad (u^\mu u_\mu = 1)$$

を定めると，これに m を掛けた積が狭義の運動量の4元ベクトルになる．すなわち

$$\pi^\mu \equiv m\,u^\mu \equiv (M, \boldsymbol{\pi}).$$

方程式 (21) と (21′) は，形式上共変な方程式

$$\mathrm{d}\pi^\mu/\mathrm{d}\tau = e\,F^{\mu\nu}\,u_\nu \tag{23}$$

あるいは

$$\frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau} = \frac{e}{m}F^{\mu\nu}\,u_\nu$$

に同値である．ここで $F^{\mu\nu}$ は電磁テンソル（式 (8)−(9)）である．

これらの運動法則をラグランジュまたはハミルトンの形式論から導き出すこともできる（第1章，問題5を参照）．運動量 $\boldsymbol{p}$ はエネルギー E とともに一つの4元ベクトル p^μ をつくり，これは

$$p^\mu = \pi^\mu + e\,A^\mu \tag{24}$$

という関係によって π^μ に結びつけられる．すなわち，

$$E = M + e\varphi, \qquad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{\pi} + e\,\boldsymbol{A}.$$

関係 (24) と (20) に合わせて，ハミルトン関数は

$$H \equiv e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\,\boldsymbol{A})^2 + m^2} \tag{25}$$

であるとする．この定義から，ハミルトンの正準方程式

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t = \boldsymbol{\pi}/M, \qquad \mathrm{d}\boldsymbol{p}/\mathrm{d}t = -\,e\,\mathrm{grad}\,(\varphi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A})$$

が導かれる．第1式は速度の定義である．第2式は方程式 (21) に同値である．このことは，場 $\mathcal{E}$ と $\mathcal{H}$ の定義（式 (7)）を使い，

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\mathrm{grad}\right)\boldsymbol{A}$$

という事実を利用すれば，容易に証明される．

II．クライン＝ゴルドン方程式とディラック方程式

§5. クライン＝ゴルドン方程式

電子に対する相対論的波動方程式の研究はスピンの存在によって複雑になる．そこでまずスピン0の1粒子，たとえば π 中間子に対する相対論的波動方程式をつくってみる．

このような粒子は内部自由度をもたず，その波動関数 Ψ は変数 $\boldsymbol{r}$ と t だけを含む．粒子の質量を m，電荷を e で表わし，これが電磁ポテンシャル $A^{\mu} \equiv (\varphi, \boldsymbol{A})$ のなかにあると考える．

波動方程式を求めるのに，われわれは経験的な方法をとり，対応原理を使う．そうすれば，古典近似の成立条件が満たされるとき，古典運動法則にもどることが保証される．

シュレーディンガーの対応規則

$$E \longrightarrow \mathrm{i}\partial/\partial t, \qquad \boldsymbol{p} \longrightarrow -\mathrm{i}\nabla \tag{26}$$

を思い出そう．$p^{\mu} \equiv (E, \boldsymbol{p})$ と置けば，この規則はもっと簡単に

$$p^{\mu} \longrightarrow \mathrm{i}\partial^{\mu} \tag{26'}$$

と書き表わされる．

ハミルトニアンを表わす式 (25) から

$$E = e\varphi + \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2} \tag{27}$$

が得られ，これに規則 (26) を当てはめると，波動方程式

$$\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)\Psi = \left[\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla - e\boldsymbol{A}\right)^2 + m^2\right]^{1/2}\Psi$$

が導き出される．この方程式には二つの重大な欠点がある．第一に，空間座標と時間座標のあいだに対称性がないため，相対論的不変性およびそれから生じる諸性質が明瞭に現われていない．第二に，右辺の演算子が平方根であるため，場 $\boldsymbol{A}$ が 0 であるときを除けば，実際上扱いようがない．

これら二つの困難を避けるために，対応の手続きの出発点として関係 (20) をとる．これからは，

$$(E - e\varphi)^2 - (\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 = m^2 \tag{28}$$

が得られる．この関係は (27) に同値ではなく，もっと一般的な関係

$$E = e\varphi \pm \sqrt{(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 + m^2} \tag{29}$$

に同値である．符号 + だけが実の古典解に対応する．符号 − は負の質量をもつ解を表わし，物理的意味はまったくない．それゆえ関係 (28) を出発点にとれば，負の質量に対する寄生解を導入することになる．

これらのことを保留した上で，(28) に対応の手続きを施せば，**クライン＝ゴルドン方程式**

$$\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2 - \left(\frac{1}{\mathrm{i}}\nabla - e\boldsymbol{A}\right)^2\right]\Psi = m^2\Psi \tag{30}$$

を得る．これはまた，

$$(D_{\mu}D^{\mu} + m^2)\Psi \equiv [(\partial_{\mu} + \mathrm{i}e A_{\mu})(\partial^{\mu} + \mathrm{i}e A^{\mu}) + m^2]\Psi = 0 \tag{30'}$$

という形にも書かれ，この相対論的不変性は明瞭である．

この方程式の解釈について簡単に論じておく (6)．議論を簡単にするため，場が0の場合に限る．このとき方程式は単に

$$(\square + m^2)\Psi = 0 \tag{31}$$

と書き表わされる（第2章，§12を参照）．

これは時間に関して2階の微分方程式である．それゆえ，ある時刻よりあとの各瞬間において Ψ が完全に決められるためには，初めの時刻における Ψ と $\partial\Psi/\partial t$ とが同時に知られていなければならない．この困難はつぎの要請によって容易に乗り越えられる．すなわち，与えられた瞬間における系の力学的状態は関数 Ψ だけによって表わされるのではなく，二つの関数 Ψ と $\partial\Psi/\partial t$ の組，あるいは二つの線形結合

$$\Phi = \Psi + \frac{\mathrm{i}}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad \chi = \Psi - \frac{\mathrm{i}}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

によって表わされると考える．このことは，系の状態が二つの成分 Φ, χ をもつ一つの関数によって表わされることを要請するのと同じである．この波動関数は時間に関して1階の微分方程式にしたがう．この方程式をクライン=ゴルドン方程式から導き出すのは容易である．非相対論的極限において，この粒子のエネルギーは明らかに静止質量 m に等しい．それゆえ

$$\mathrm{i}\partial\Psi/\partial t \simeq m\Psi$$

が得られ，したがって $\chi \ll \Phi$．すなわち二つの成分のうち一方が他方にくらべて無視できるようになり，シュレーディンガーの非相対論的な理論がもう一度得られる．この理論によれば，スピン0の1粒子の力学的状態は一つの成分から成る波動関数によって表わされるのであった．

ところで，波動関数と解釈しうるためには，存在の確率密度 P と流れの密度 $\boldsymbol{j}$ を定義し，これらが連続の条件（第4章，§4を参照）

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0 \tag{32}$$

を満たすようにする必要がある．記号 $j^\mu \equiv (P, \boldsymbol{j})$ を使えば，(32) はまた

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \tag{33}$$

となる．

Ψ と Ψ^* は両方とも方程式 (31) を満たすから，

$$\Psi^*(\square\Psi) - (\square\Psi^*)\Psi = 0$$

---

(6) もっと詳しい説明については，H. FESHBACH と F. VILLARS, *Rev. Mod. Phys.*, **30** (1958), 24 を見よ．ここには主な文献のリストも見いだされる．

が成り立ち，ダランベール演算子の定義を使えば，これから

$$\partial_\mu[\Psi^*(\partial^\mu\Psi)-(\partial^\mu\Psi^*)\Psi]=0$$

を得る．左辺の括弧のなかに比例するように j^μ をとれば，連続の条件は満たされる．われわれは非相対論的極限において普通の定義が得られるように比例定数を定める．そのために，

$$j^\mu=\frac{\mathrm{i}}{2m}[\Psi^*(\partial^\mu\Psi)-(\partial^\mu\Psi^*)\Psi],$$

すなわち

$$P(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mathrm{i}}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\right],\qquad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{2\mathrm{i}m}[\Psi^*(\nabla\Psi)-(\nabla\Psi^*)\Psi] \quad (34)$$

と定義する．

(34) を調べると，つぎのことに注意しないわけにはゆかない．すなわち，密度 $P(\boldsymbol{r},t)$ が正の定符号ではないのである．ここにクライン＝ゴルドン方程式がもつ最大の難点の一つがある．

もう一つの難点は，やはり上に述べたことと無関係ではないが，《負のエネルギーをもつ解》の可能性からもたらされる．たとえば，場のない方程式の解として平面波

$$\Psi=\exp[-\mathrm{i}(Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]$$

を求めるとき，この式を方程式 (31) に代入すれば，条件

$$E=\pm\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$$

を得る．それゆえ，負のエネルギー $-\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2}$ をもつ解が存在する．このような解が生じる原因は明らかである．それはすでに指摘したように，負の質量を理論に導入したことによる（このような解は負の質量をもつ解と呼ぶのがいっそう正確かもしれない；しかし場が 0 であるとき，質量とエネルギーの区別は意味がない）．

パウリとヴァイスコップにしたがって[7]，4元ベクトル j^μ の解釈と平均値の定義を修正することにより，これらの困難をすべて処理することができる．それによって理論を解釈しなおすと，ej^μ は流れの密度の4元ベクトルであり，そのうち $eP(\boldsymbol{r},t)$ は電荷密度である．それゆえ (33) は電荷保存の方程式となる．これに反して，粒子の個数は保存されない．このことは，逆の電荷をもつ粒子の対が消滅したり生成したりする可能性と解釈される．すべてこのような現象については，場の理論によらないと満足な説明が与えられない．このように解釈すれば，この理論は電荷に関する理論となり，粒子に関する理論ではなくなる．これに反してディラックの理論においては，正の定符号をもつ密度 P を定

(7) W. Pauli と V. Weisskopf, *Helv. Phys. Acta*, **7** (1934), 709. また，H. Feshbach と F. Villars の前頁の論文を見よ．

義することができる．しかしあとでわかるように，負のエネルギーの困難はここにも引き継がれ，その結果としてディラックの理論もまた，1粒子の理論としてまったく満足すべきものとは考えられない（第IV節）．

§6. ディラック方程式

ここで電子に対する相対論的波動方程式をつくることにする．ディラックにしたがい，非相対論的量子力学から類推することによってさきへ進もう．

非相対論的理論における電子は2成分をもつスピノールによって表わされ，回転によるスピノールの変換法則は角運動量 1/2 の変換法則である．これと同じように，相対論的理論における電子はいくつかの成分をもつ波動関数によって表わされ，これらの成分はローレンツ変換から成るいっそう広い群に関して，はっきり決まった変換法則を満たさなければならない．波 $\varPsi$ の s 番目の成分を $\psi_s(\boldsymbol{r},t)$ と表わせば，$\varPsi$ は1列から成る行列

$$\varPsi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \psi_N\end{pmatrix}$$

の形に書き表わされる．

非相対論的な場合と同じように，与えられた時刻において波 $\varPsi$ は軌道変数 $\boldsymbol{r}$ と内部変数すなわちスピン変数 $s\,(s=1,2,\cdots,N)$ の関数とみなすこともできる．このような波は一つの状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を表わし，この状態の〔定められる〕空間 $\mathcal{E}$ は軌道変数の空間 $\mathcal{E}^{(0)}$ とスピン変数の空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ のテンソル積

$$\mathcal{E}=\mathcal{E}^{(0)}\otimes\mathcal{E}^{(s)}$$

である．波 $\varPsi$ は適当な表現においてこのベクトルを表わすものである．すなわち

$$\varPsi(\boldsymbol{r},s,t)\equiv\psi_s(\boldsymbol{r},t)=\langle\boldsymbol{r}\,s|\varPsi(t)\rangle.$$

同じ類推をつづけて，点 $\boldsymbol{r}$ に存在する確率密度を

$$P(\boldsymbol{r},t)=\sum_{s=1}^{N}|\psi_s|^2 \tag{35}$$

によって定義する．

これだけ仮定すれば，波動方程式は必ず

$$\mathrm{i}\partial\varPsi/\partial t=H_D\varPsi \tag{36}$$

という形をとり，H_D は状態空間のエルミート演算子になる．実際，$\varPsi$ は各瞬間における電子の力学的状態を完全に定めるのであるから，波動方程式は時間に関して1階でなければならない．さらに，H_D がエルミートであることによって，$P(\boldsymbol{r},t)$ に関するわれわれの定義の一貫性が保証される（第4章，§3を参照）．

われわれが求めているのは相対論的方程式であるから，われわれはさらに，この方程式が空間座標と時間座標に関して，ある形式的な対称性を示すこと，すなわち空間の変数についても 1 階であることを要求する．

ここでまず，場がないときの 1 電子の場合を考える．このときハミルトニアンは並進によって不変でなければならないから，$\boldsymbol{r}$ を含まない．それゆえ，さきに述べた仮定をすべて考慮すれば，これを

$$H_D = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m \tag{37}$$

という形に書き表わすことができる．ここで $\boldsymbol{p}$ は対応規則 (26) によって定められた意味をもつ．すなわち $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\nabla$．そして $\boldsymbol{\alpha} \equiv (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ と β はスピン変数だけに作用する 4 個のエルミート演算子を表わす．記号 $E \equiv \mathrm{i}\partial/\partial t$ を採用すれば，この波動方程式は

$$[E - \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} - \beta m]\Psi = 0 \tag{38}$$

と書かれる．$\boldsymbol{\alpha}$ と β を定めるには，対応原理に訴える．すなわち，この方程式の解はクライン＝ゴルドン方程式

$$[E^2 - \boldsymbol{p}^2 - m^2]\Psi = 0 \tag{39}$$

にしたがうことを要請する．(38) に演算子 $[E + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m]$ を左から掛けると，2 階の方程式

$$[E^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 - \beta^2 m^2 - \sum_{k<l} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) p^k p^l - \sum_k (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) m p^k]\Psi = 0$$

を得る．

この方程式が (39) と同じになるためには，

$$\begin{aligned} (\alpha^k)^2 &= 1, & \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k &= 0 \qquad (k \neq l), \\ \beta^2 &= 1, & \alpha^k \beta + \beta \alpha^k &= 0, \end{aligned} \tag{40}$$

すなわち，4 個の演算子 β, $\boldsymbol{\alpha}$ が互いに反交換し，それぞれの二乗が 1 に等しければよい．エルミート行列 β, $\boldsymbol{\alpha}$ が関係 (40) を満たすように選ばれたとき，方程式 (38) はディラック方程式になる．

自由電子に関するこの方程式から，電磁場 $(\varphi, \boldsymbol{A})$ のなかの 1 電子に関するディラック方程式に移るには，

$$E \longrightarrow E - e\varphi, \qquad \boldsymbol{p} \longrightarrow \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A} \tag{41}$$

という置き換えを行なう［ここで e は電子の電荷 $(e < 0)$］．その結果，

$$[(E - e\varphi) - \boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) - \beta m]\Psi = 0, \tag{42}$$

すなわち，

$$\left[\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right) - \boldsymbol{\alpha}\cdot(-\mathrm{i}\nabla - e\boldsymbol{A}) - \beta m\right]\Psi = 0 \tag{43}$$

を得る．この方程式を (36) と比較すれば，場が存在するときのディラックのハミルトニアンとして，式

$$H_D = e\varphi + \boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}) + \beta m \tag{44}$$

を得る．

§7. 空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ の構成．ディラック表現

残されたのは空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ の構成である．この空間に作用する演算子は 4 個の基底演算子 β, α_x, α_y, α_z と，これらの関数としてつくられるすべての演算子である．空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ はこれらの演算子の集合に関して既約でなければならない．

これを構成するためには，4 個の基底演算子のエルミート性と，それらの代数的性質を定めた関係 (40) を利用する．

これらの性質は，スピン 1/2 の非相対論的理論における三つの演算子 σ_1, σ_2, σ_3 の性質に似ている．あの場合，スピン変数の作用する空間 $\mathcal{E}^{(\sigma)}$ は 2 次元であった．それはまたつぎのようにしてつくられた．σ_3 はエルミートで $\sigma_3^2 = 1$ であるから，これがとりうる固有値は， $+1$ と -1 だけである．さらに，σ_3 の各固有ベクトルに，反対符号の固有値に対応する固有ベクトルを一つずつ結びつけることができる．実際，具体的に考えるため，$\sigma_3|+\rangle = |+\rangle$ となる一つのベクトル $|+\rangle$ をとる．σ_3 と σ_1 は反交換するから，ベクトル $|-\rangle \equiv \sigma_1|+\rangle$ は $\sigma_3|-\rangle = (-1)|-\rangle$ という性質をもつ．さらに $\sigma_1|\pm\rangle = |\mp\rangle$, $\sigma_3|\pm\rangle = (\pm 1)|\pm\rangle$ に注意する．それゆえ，ベクトル $|+\rangle$ と $|-\rangle$ によって張られる空間は演算子 σ_3, σ_1 およびこれらの関数 (特に $\sigma_2 \equiv \mathrm{i}\sigma_1\sigma_3$) に関して不変である．この空間が既約であることは，これをつくった方法そのものからわかる．だからこれが求める空間 $\mathcal{E}^{(\sigma)}$ である．また，基底ベクトルとして $|+\rangle$ および $|-\rangle$ をとって演算子 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ を表現すれば，パウリ行列が得られる (第 13 章，§19 または第 7 章，公式 (65) を参照)．

$\mathcal{E}^{(s)}$ をつくる問題も上の問題に帰着させられる．演算子 σ_x, σ_y, σ_z および ρ_1, ρ_2, ρ_3 を導入してつぎのように定義する：

$$\sigma_z = -\mathrm{i}\alpha_x\alpha_y, \qquad \sigma_x = -\mathrm{i}\alpha_y\alpha_z, \qquad \sigma_y = -\mathrm{i}\alpha_z\alpha_x, \tag{45}$$

$$\rho_3 = \beta, \qquad \rho_1 = \sigma_z\alpha_z = -\mathrm{i}\alpha_x\alpha_y\alpha_z, \qquad \rho_2 = \mathrm{i}\rho_1\rho_3 = -\beta\alpha_x\alpha_y\alpha_z. \tag{46}$$

4 個の基底演算子は ρ と σ の関数として公式

$$\beta = \rho_3, \qquad \alpha^k = \rho_1\sigma^k \tag{47}$$

によって表わされる．

そこで $\mathcal{E}^{(s)}$ をつくることは，ρ に関して既約な空間と σ に関して既約な空間をつくることに帰着する．実際，つぎのことが容易にわかる．

i) ρ は σ と交換する.

ii) σ はエルミート，二乗すれば1，そして互いに反交換する.

iii) ρ はエルミート，二乗すれば1，そして互いに反交換する.

したがってつぎのようになる：

i) $\mathcal{E}^{(s)}$ は ρ に関して既約な空間 $\mathcal{E}^{(\rho)}$ と σ に関して既約な空間 $\mathcal{E}^{(\sigma)}$ とのテンソル積

$$\mathcal{E}^{(s)} = \mathcal{E}^{(\rho)} \otimes \mathcal{E}^{(\sigma)}$$

である.

ii) $\mathcal{E}^{(\sigma)}$ は2次元の空間で，上に示した方法にしたがってつくられる.

iii) $\mathcal{E}^{(\rho)}$ も2次元の空間で，同じ方法によってつくられる.

それゆえ空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ は4次元である.

このあとの数節で示されるように，σ はスピンに，ρ はエネルギーの符号に結びつけられ，ディラック方程式はクライン＝ゴルドン方程式のように——同じ事情により——負のエネルギーの解をもつ．特に $\boldsymbol{\alpha}$ が（極性の）ベクトル演算子であり，$\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ が（軸性の）ベクトル演算子であることもわかるであろう．さらに

$$\boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\alpha} = 2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \tag{48}$$

が形式的に成り立つ.

電子のスピンは $(1/2)\boldsymbol{\sigma}$ であり，エネルギーの符号はおおよそのところ $\beta \equiv \rho_3$ の固有値によって与えられる.

したがって電子の力学的状態は4成分をもつ関数 Ψ によって表わされ，成分の数はスピン 1/2 をもつ非相対論的理論の波の2倍である．ρ と σ がパウリ行列で表わされるような表現を**ディラック表現**と名づける（第7章 (65), (66) を参照)．この表現においては，各成分は軸 Oz の方向に対して与えられたスピンの向きと，おおよそのところエネルギーの与えられた符号に対応する.

§8. ディラック方程式の共変形式

方程式 (43) はディラック方程式をディラック自身によって最初に提案されたとおりに書いたものである．これを物理的に解釈し，非相対論的極限への移行を研究するとき，最も取り扱いやすいのはこの形式である．ここでもう一つの形式を求めてみよう．それは空間と時間の座標に関していっそう対称的であり，したがって，相対論的共変性が重要な役割を演じる状況のもとではつねにディラックの形式より便利なものである.

そのために，(43) の両辺に左から β を掛け，

$$\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) \equiv (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma}), \qquad \gamma^0 \equiv \beta, \qquad \boldsymbol{\gamma} \equiv \beta\boldsymbol{\alpha} \tag{49}$$

と置けば，

$$\boxed{[\mathrm{i}\gamma^\mu D_\mu - m]\Psi \equiv [\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0} \tag{50}$$

となる．

定義 (49) を使えば，γ^μ の性質は $\boldsymbol{\alpha}$ と β の性質から容易に得られる．10 個の関係 (40) から，これと同値な 10 個の関係

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \tag{51}$$

が与えられる．$\boldsymbol{\alpha}$ と β がエルミートであるという条件は条件

$$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \qquad \gamma^{k\dagger} = -\gamma^k \tag{52}$$

に同値であり，これはもっと簡潔な形

$$\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 \tag{53}$$

で書き表わされる．

添字の上げ下げに関する普通の規則を γ にまで拡張し，

$$\gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu \tag{54}$$

と決めるとつごうがよい．

$$\gamma_0 = \gamma^0, \qquad \gamma_k = -\gamma^k \tag{55}$$

および

$$\gamma^\mu = \gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu^{-1} \tag{56}$$

に注意する．

§9. 随伴方程式．流れの定義

われわれはすでに正の定符号をもつ存在確率密度を定義した（式 (35)）．上に指摘したように，ディラックのハミルトニアンがエルミートであることにより，この定義の一貫性は保証される．事柄を詳しく述べるために，流れの密度を定義し，ディラック方程式の解によって定められる流れは連続の方程式にしたがうことを証明しよう．われわれはまずディラックの形式を使ってこの問題を徹底的に論じ，それから共変形式により同じ議論を繰り返すことにする．

β と $\boldsymbol{\alpha}$ に関する特殊な表現を選んであるとする．このとき波 Ψ は 4 行 1 列の行列

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix}$$

によって表わされる．これのエルミート共役を $\Psi^\dagger$ で表わす．すなわち

$$\Psi^\dagger \equiv (\phi_1^* \ \phi_2^* \ \phi_3^* \ \phi_4^*).$$

スピン空間の演算子は 4×4 型の行列であり，スピン変数だけに関して加えることによって，部分的内積をつくることができる．このような内積を示すために，括弧をつける．この記法により，密度 P は

$$P(\boldsymbol{r},t) = (\Psi^\dagger\Psi) \tag{57}$$

と書き表わされる．もう一つの表わし方として，行列 β の第 s 行第 t 列の要素を β_{st} とするとき $(s,t=1,2,3,4)$，

$$(\Psi^\dagger\beta\Psi) \equiv \sum_s\sum_t \phi_s^*\beta_{st}\phi_t$$

が成り立つ．

ところで，Ψ がディラック方程式の解であるとき，すなわち，

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H_D\Psi = \left[e\varphi + \sum_k \alpha^k\left(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^k} - eA^k\right) + \beta m\right]\Psi \tag{58}$$

であるとき，$\Psi^\dagger$ はエルミート共役な方程式の解である．その方程式を導くには，複素共役をとった上で各行列を転置すればよい．すなわち，

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t} = -\Psi^\dagger H_D = -e\varphi\Psi^\dagger - \sum_k\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^k} - eA^k\right)\Psi^\dagger\alpha^k - m\Psi^\dagger\beta. \tag{59}$$

(58) に左から $\Psi^\dagger$ を掛けて内積をとり，(59) に右から Ψ を掛けて内積をとり，辺ごとに加えれば，

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^\dagger\Psi) = -\mathrm{i}\sum_k\frac{\partial}{\partial x^k}(\Psi^\dagger\alpha^k\Psi) \tag{60}$$

となる．左辺には確率密度の時間に対する変化率が見られる．また，

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = (\Psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}\Psi) \tag{61}$$

によって一つのベクトル $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ を定義すれば，(60) の右辺にはその発散が見られる．$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ が求める流れの密度であり，(60) は連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0$$

に同値である．

ディラック方程式の共変形式（式(50)）から出発しても同じ処理を施すことができる．(50) のエルミート共役は

$$(-\mathrm{i}\partial_\mu - eA_\mu)\Psi^\dagger\gamma^{\mu\dagger} - m\Psi^\dagger = 0 \tag{62}$$

である [この式のなかで，記号 $\partial_\mu\Psi^\dagger\gamma^{\mu\dagger}$ は1行4列の行列 $(\partial\Psi^\dagger/\partial x^\mu)\gamma^{\mu\dagger}$ を表わす]．便宜上

$$\overline{\Psi} = \Psi^\dagger\gamma^0, \qquad \Psi^\dagger = \overline{\Psi}\gamma^0 \tag{63}$$

と置く．関係 (53) を考慮して，方程式 (62) に左から γ^0 を掛ければ，もっと簡単な形になる．すなわち：

$$\boxed{(-\mathrm{i}\partial_\mu - eA_\mu)\overline{\Psi}\gamma^\mu - m\overline{\Psi} = 0.} \tag{64}$$

この方程式は明らかに方程式 (50) と同値である．$\overline{\Psi}$ は Ψ の随伴（アジョイント）と呼ばれ，(64) は随伴方程式と呼ばれる．

(50) には左から $\overline{\Psi}$ を，(64) には右から Ψ を掛け，それぞれ内積をつくって差をとれば，

$$\mathrm{i}\partial_\mu(\overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi) = 0$$

となる．そこで流れの密度を4元ベクトル

$$j^\mu \equiv (\overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi) \tag{65}$$

によって定義すれば，上の方程式は連続の方程式

$$\partial_\mu j^\mu = 0$$

に同値である．容易に確かめられるように $j^\mu \equiv (P, \boldsymbol{j})$ である．それゆえ，さきに求めた連続の方程式が共変形式に書かれてもう一度得られたことになる．j^μ の4成分が実際に4元ベクトルをつくることはつぎの節で示される．

III. ディラック方程式の不変性

10. ディラック行列の性質

ディラック方程式の不変性を研究するとき必要となるので，4行4列の行列4個からなる系 $\gamma^\mu \equiv (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ が関係

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}I \tag{66}$$

(I は単位行列)を満たすと仮定し，この系の性質を系統的に調べよう．行列間の関係 (66) は演算子間の関係 (51) と似ているが，ここに導入された行列は必ずしもユニタリ性の条件 (53) を満たさない．これから述べる性質はすべて (66) だけから導かれる．

行　列 γ^A

γ^μ は互いに反交換し，それぞれの二乗は $+I$ か $-I$ に等しいから，これらをいく

つか掛けて得られる積は，符号だけを無視するとき，いずれも16個の特殊な行列の一つに等しい．それらのリストは20·1表に与えられ，今後はこれらを γ^A によって表わす．

20·1表 行列 γ^A のリスト

記号		具体的な形	
		$(\gamma^A)^2=I$	$(\gamma^A)^2=-I$
(S)	$1\equiv$	I	
(V)	$\gamma^\mu\equiv\{\gamma^0,\gamma^k\}\equiv$	γ^0	$\gamma^1\quad\gamma^2\quad\gamma^3$
(T)	$\gamma^{[\lambda\mu]}\equiv\{\gamma^k\gamma^0,\gamma^5\gamma^0\gamma^k\}\equiv$	$\gamma^1\gamma^0\quad\gamma^2\gamma^0\quad\gamma^3\gamma^0$	$\gamma^2\gamma^3\quad\gamma^3\gamma^1\quad\gamma^1\gamma^2$
(A)	$\gamma^{[\lambda\mu\nu]}\equiv\{\gamma^0\gamma^5,\gamma^k\gamma^5\}\equiv$	$\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	$\gamma^0\gamma^2\gamma^3\quad\gamma^0\gamma^3\gamma^1\quad\gamma^0\gamma^1\gamma^2$
(P)	$\gamma^{[\lambda\mu\nu\rho]}\equiv\gamma^5\equiv$		$\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$

これらは (S)，(V)，(T)，(A)，(P) で表わされた五つの組に分けられ，これらの組はそれぞれ 1，4，6，4，1 個の要素を含む．このように分ける理由は本節のつづき (§14 を参照) で明らかにされよう．

$(\gamma^A)^2$ が場合により I または $-I$ に等しいことは自明である．二乗が I になる6個の行列は左の列に，二乗が $-I$ になる10個の行列は右の列にまとめられている．

これらの行列のうち，他のすべてのものと交換するのは I だけである．$\gamma^A\neq I$ であれば，γ^A は16個の行列のうちの8個と反交換し，他の8個と交換する．

特に，

$$\gamma^5\equiv\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 \tag{67}$$

によって定義される行列 γ^5 (8) は，γ^μ と反交換し，その二乗は $-I$ である．すなわち

$$\gamma^5\gamma^\mu+\gamma^\mu\gamma^5=0 \tag{68}$$

$$(\gamma^5)^2=-I. \tag{69}$$

逆行列 γ_A

行列 γ_μ は関係

$$\gamma_\mu=g_{\mu\nu}\gamma^\nu \tag{70}$$

によって定義される．明らかに，

$$\gamma_\mu\gamma^\mu=\gamma^\mu\gamma_\mu=I \qquad (\mu \text{ についての和はとらない})$$

であるから，行列 γ^A の逆を求めるには，そこに現われる行列 γ^μ の順序を逆にし，それぞれ対応する行列 γ_μ に置き換えればよい．こうして得られる行列を γ_A で表わせば，

$$\gamma_A\gamma^A=\gamma^A\gamma_A=I. \tag{71}$$

(8) 添字4は普通の場合，時間成分を表わすのに用いられる．すなわち $x^4=ix^0=ict$.

この方法によって逆をつくることにすれば，

$$\gamma_5 = \gamma_3\gamma_2\gamma_1\gamma_0.$$

跡と行列式

$$\mathrm{Tr}\,\gamma^A = \begin{cases} 4 & (\gamma^A = I \text{ のとき}) \\ 0 & (\gamma^A \neq I \text{ のとき}) \end{cases} \tag{72}$$

が成り立つ．

実際，$\gamma^A \neq I$ とし，これと反交換する8個の行列の一つを γ^B とすれば，

$$\gamma^A = -\gamma^B\gamma^A\gamma_B.$$

それゆえ

$$\mathrm{Tr}\,\gamma^A = -\mathrm{Tr}\,\gamma^B\gamma^A\gamma_B = -\mathrm{Tr}\,\gamma_B\gamma^B\gamma^A = -\mathrm{Tr}\,\gamma^A = 0.$$

ついでながら，つぎのことに注意する（問題3）：

$$\det\gamma^A = 1.$$

並べかえの補助定理

簡単な視察により，つぎの性質が確かめられる：

16個の行列 γ^A のなかから任意に一つを選び，それを γ^A の一つ一つに右から（または左から）掛けると，順序と符号は別にして，同じ行列の集まりが得られる．

線形独立性と既約性

並べかえの補助定理と跡の性質を使えば，つぎのことが容易に示される：

1° 16個の行列 γ^A は線形独立である．

2° 任意の4次正方行列 M は γ^A の線形結合として一意的に表わされる．すなわち

$$M = \sum_A m_A\gamma^A, \qquad m_A = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\,\gamma_A M.$$

3° すべての γ^μ と交換する行列，したがってすべての γ^A と交換する行列は単位行列の定数倍である．すなわち，

$$\text{任意の } \mu \text{ に対して } [M, \gamma^\mu] = 0 \text{ ならば} \qquad M = \text{定数} \times I.$$

基本定理

γ^μ も γ'^μ も4個の4次正方行列からなる系であり，関係 (66) を満たすものとする．このとき，

$$\gamma^\mu = S\gamma'^\mu S^{-1} \qquad (\mu = 0, 1, 2, 3) \tag{73}$$

となるような行列 S が存在し，S は定数を除いて定まり，正則 ($\det S \neq 0$) である．

この定理の証明はつぎのような順序で進める．系 γ^μ, γ'^μ にはそれぞれ 16 個の行列 γ^A, γ'^A が対応する．その定義と主な性質は上に述べたとおりである．このとき特殊な γ^A の一つ一つにある行列 γ'^A が対応し，添字 A は全部で 16 個の異なる値をとりうる．ところで，ある一つの行列 F に対して，

$$S \equiv \sum_A \gamma'^A F \gamma_A$$

によって定められる行列 S を考える．$\sum_A$ は添字 A のとりうる 16 個の値について和をとることを示す．

特殊な行列 γ^B をとり，その逆を γ_B，他の系の対応する行列を γ'^B とすれば，並べかえの補助定理により，

$$\gamma'^B S \gamma_B \equiv \sum_A \gamma'^B \gamma'^A F \gamma_A \gamma_B = \sum_A \gamma'^A F \gamma_A \equiv S,$$

したがって

$$\gamma'^B S = S \gamma^B \tag{74}$$

を得る．

この行列 S によって関係 (73) が成り立つためには，S が逆をもつ必要がある．このことを示すために，与えられた任意の行列 G に対して，

$$T \equiv \sum_A \gamma^A G \gamma'_A$$

によって定められる行列 T を導入する．前と同じような議論により，

$$\gamma^B T = T \gamma'^B$$

が示される．それゆえ，任意の γ^B に対して，

$$\gamma^B TS = T\gamma'^B S = TS\gamma^B$$

が成り立つ．TS はすべての行列 γ^B と交換するから，単位行列の定数倍である．すなわち $TS = c \times I$. 定数 c はつぎの式で与えられる：

$$c = \frac{1}{4}\operatorname{Tr} TS = \frac{1}{4}\sum_A \sum_B \operatorname{Tr} \gamma^A G \gamma'_A \gamma'^B F \gamma_B$$

$$= \frac{1}{4}\operatorname{Tr} G \Big(\sum_A \sum_B \gamma'_A \gamma'^B F \gamma_B \gamma^A\Big) = 4 \operatorname{Tr} GS.$$

ところで，S が少なくとも一つ 0 と異なる要素をもつように F を選ぶことはいつでもできる．実際，容易に示されるように，どのような F に対しても S が零行列となるならば，16 個の行列 γ^A が線形独立ではなくなる (*)．S が零行列でないように F を決めたならば，

(*) ［訳注］ S を γ^A の線形結合で表わすことはできるが，その係数のうちに 0 でないものがあることを証明するのは容易でない．

むしろ，γ'^A を γ^A の線形結合で表わしたのち，$\operatorname{Tr} S$ を考えるのがよいであろう．F に 16 個の γ^A を代入したとき，つねに $\operatorname{Tr} S = 0$ とすれば矛盾が導かれる．

$$\mathrm{Tr}\,GS \equiv \sum_s \sum_t G_{st} S_{ts} = \frac{1}{4}$$

となるように行列 G を選ぶことはいつでもできる．このとき $c=1$，したがって $T=S^{-1}$ が成り立つ．それゆえ S は確かに逆をもち，(74) の両辺に S^{-1} を掛ければ，性質 (73) を導くことができる．

もう一つの行列 S' が同じ性質をもてば，$S^{-1}S'$ はすべての γ^μ と交換し，したがって $S^{-1}S' = 定数 \times I$ となる．逆に，S が性質 (73) をもつなら，Sの定数倍はすべてこの性質をもつ．つまり正則な行列 S が存在して，定数を除いて定まる． (証明終)(*)

ユニタリ行列 γ^μ

関係 (66) を満たす γ^μ がユニタリであるとき，すなわち

$$\gamma_\mu \equiv \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 = \gamma^{\mu\dagger} \tag{75}$$

であるとき，行列 γ^A はすべてユニタリである．それゆえ，$(\gamma^A)^2$ が $+I$ に等しいか $-I$ に等しいかによって，γ_A はエルミートまたは反エルミートである．

基本定理を補うのはつぎの系である．その証明は読者に任せる．

4個の4次ユニタリ行列から成る二つの系 γ^μ と γ'^μ が関係 (66) を満たすとする．こ

(*) ［訳注］ 基本定理の証明に対する補足．

16個の行列 γ^A に番号を付け，$\Gamma^1 = I, \Gamma^2, \cdots, \Gamma^{16}$ で表わし，$\Gamma^i \Gamma_i = I$ とする．γ'^A についても同様の記号を使えば，

$$\Gamma'^i = \sum_j m^i_j \Gamma^j \qquad (i=1, \cdots, 16).$$

ここで $m^i_i = m_i$ と書く．$m_1 = 1$ に注意する．

任意の行列 F に対して

$$S \equiv \sum_A \gamma^{A'} F \gamma_A = \sum_{i,j} m^i_j \Gamma^j F \Gamma_i$$

が零行列になると仮定して矛盾を導こう．F としては16個の行列 Γ^k を考えれば十分である．そのため $\Gamma^j \Gamma^k = \varepsilon^{jk} \Gamma^k \Gamma^j$ と置けば，

$$\varepsilon^{jk} = \begin{cases} +1 & (\Gamma^k \text{ が } \Gamma^j \text{ と交換するとき}) \\ -1 & (\Gamma^k \text{ が } \Gamma^j \text{ と反交換するとき}). \end{cases}$$

ここで $F = \Gamma^k$ とすれば，

$$S = \sum_{i,j} m^i_j \Gamma^j \Gamma^k \Gamma_i = \Gamma^k \sum_{i,j} \varepsilon^{jk} m^i_j \Gamma^j \Gamma_i = 零行列.$$

したがって

$$\sum_{i,j} \varepsilon^{jk} m^i_j \Gamma^j \Gamma_i = 零行列.$$

両辺の跡をとれば，

$$\sum_i \varepsilon^{ik} m_i = 0 \qquad (k = 1, \cdots, 16).$$

これを m_i について解けば，

$$m_1 = m_2 = \cdots = m_{16} = 0$$

となり，$m_1 = 1$ とのあいだに矛盾を生じる（巻末の「訳者の付録」を参照）．

のとき$\gamma'^{\mu}=U\gamma^{\mu}U^{\dagger}(\mu=0,1,2,3)$ となるようなユニタリ行列 U は，位相を除いてただ一つ存在する．

複素共役．B 行列

特に，γ^{μ} がユニタリで関係 (66) を満たすときには，4個の複素共役行列 $\gamma^{\mu *}$ もまたユニタリであり，やはり関係 (66) を満たす．そこで上の系を適用すれば，γ^{μ} が $\gamma^{\mu *}$ からユニタリ変換によって導き出される．今後は，この変換を表わす行列を B で表わす (B は位相を除いて定められる)．すなわち，

$$\gamma^{\mu}=B\gamma^{\mu *}B^{\dagger}. \qquad \gamma^{\mu *}=B^{*}\gamma^{\mu}\tilde{B}. \tag{76}$$

B が反対称であること，すなわち

$$B=-\tilde{B}$$

を示すことができる（問題4）．これは

$$BB^{*}=B^{*}B=-I \tag{77}$$

と言ってもよい．

γ がディラック表現の行列であるときには，特に

$$B=B_{D}=\gamma^{2}\gamma^{5}=-\mathrm{i}\rho_{3}\sigma_{y}$$

が成り立つ．この特別な場合について性質 (77) は容易に確かめられる．

§11. 整時座標系の変換に関するディラック方程式の形式不変性

相対性原理を満たすためには，ディラック方程式と連続の方程式が，異なるローレンツ座標系に関して同じ形式を保たなければならない．厳密には，この原理が要求するのは固有ローレンツ変換に関する形式不変性だけである (9)．しかし実際には，この理論は完全群に関しても形式的に不変である．われわれは整時群に関する不変性を詳しく研究することからはじめる．時間反転による不変性については，この節の終りで，ディラック方程式に特有な他の不変性とともに，ローレンツ変換とは直接関係しない形で調べる．

そこで電子の力学的状態が座標系 (R) に関して4成分の波動関数 $\Psi(x)$ によって表わされ，$\Psi(x)$ はディラック方程式

---

(9) 空間と時間の並進に関する不変性も要求される．この§11で述べる議論と同じような議論で容易に確かめられるように，このような不変性もまた上記の方程式によって満たされる．座標の原点が4元ベクトル a^{μ} に相当するだけずらされるとき，すなわち $x'^{\mu}=x^{\mu}+a^{\mu}$ であるとき，$A'^{\mu}(x')=A^{\mu}(x)$ が得られ，波動関数の変換法則（すなわち法則 (85) に当たるもの）は簡単に

$$\Psi'(x')=\Psi(x)$$

と書かれる．

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - e\,A_\mu(x)) - m]\Psi(x) = 0 \tag{78}$$

を満たすとする．空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ の演算子に対しては一つの表現を選んで固定しておくと考える．それゆえここでは，記号 γ^μ ははっきり決まった行列を表わし，関係 (78) はつぎの 4 個の方程式 $(s = 1, 2, 3, 4)$ を表わすことになる：

$$\sum_{t=1,2,3,4}\sum_\mu(\gamma^\mu)_{st}\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^\mu} - e\,A_\mu(x^0\,x^1\,x^2\,x^3)\right)\psi_t(x^0\,x^1\,x^2\,x^3) - m\,\psi_s(x^0\,x^1\,x^2\,x^3) = 0.$$

波動関数の 4 成分 $\psi_s(x)$ はこの方程式にしたがう．

同じ物理系を新しい座標系 (R') に関して考え，この座標系はもとの座標系から，ある整時ローレンツ変換 $\mathcal{L}$ によって導き出されるとする．すなわち

$$(R') = \mathcal{L}(R).$$

$\mathcal{L}$ はある行列 $\Omega^\mu{}_\nu$ によって特徴づけられる．$\Omega^\mu{}_\nu$ は性質 (12) と (13) をもち（さらに $\Omega^0{}_0 > 0$ が成り立ち），座標系 (R) に関する一点の座標 x^μ と，座標系 (R') に関する同じ点の座標 x'^μ とのあいだに線形の対応を定める．すなわち反変ベクトルの変換法則（式 (11) と (15)）が定められる．これらを記号的につぎのように書く：

$$x' = \mathcal{L}\,x, \qquad x = \mathcal{L}^{-1}\,x' \tag{79}$$

偏微分演算子の変換法則は共変ベクトルのそれである．特に，

$$\partial_\mu = \partial'_\nu\,\Omega^\nu{}_\mu. \tag{80}$$

ポテンシャルについては，新しい座標系に関する共変成分を $A'_\mu(x')$ で表わせば，これらもまた共変ベクトルの変換法則によって $A_\mu(x)$ に結びつけられる．特に，

$$A_\mu(x) \equiv A_\mu(\mathcal{L}^{-1}\,x') = A'_\nu\,(x')\,\Omega^\nu{}_\mu. \tag{81}$$

$\Psi(x)$ を新しい座標の関数とみなすとき，この関数が満たす方程式を (78) から求めるには，(80) と (81) で与えられた式を (78) に代入すればよい．すなわち，

$$[\hat{\gamma}^\mu(\mathrm{i}\partial'_\mu - e\,A'_\mu(x')) - m]\Psi(\mathcal{L}^{-1}\,x') = 0, \tag{82}$$

ただし

$$\hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega^\mu{}_\rho\gamma^\rho. \tag{83}$$

4 個の行列 γ^μ は関係 (66) を満たすユニタリ行列である．4 個の行列 $\hat{\gamma}^\mu$ は必ずしもユニタリではないが，$\Omega^\mu{}_\nu$の直交性（関係 (13)）により，これらも (66) を満たす．実際，

$$\hat{\gamma}^\mu\hat{\gamma}^\nu + \hat{\gamma}^\nu\hat{\gamma}^\mu = \Omega^\mu{}_\rho\Omega^\nu{}_\sigma(\gamma^\rho\gamma^\sigma + \gamma^\sigma\gamma^\rho) = 2\Omega^\mu{}_\rho g^{\rho\sigma}\Omega^\nu{}_\sigma = 2g^{\mu\nu}.$$

それゆえ，§10 の基本定理によって，$\hat{\gamma}$ を γ に変換する正則行列 Λ が存在し，定数を除いてただ一つに定められる．すなわち，

$$\hat{\gamma}^\mu \equiv \Omega^\mu{}_\rho\gamma^\rho = \Lambda^{-1}\gamma^\mu\Lambda \qquad (\mu = 0, 1, 2, 3). \tag{84}$$

この式を (82) の左辺に代入し，

$$\Psi'(x') = \Lambda\Psi(x) \equiv \Lambda\Psi(\mathcal{L}^{-1}\,x') \tag{85}$$

と置けば，左から Λ を掛けて，

$$[\gamma^{\mu}(i\partial'_{\mu} - eA'_{\mu}(x')) - m]\Psi'(x') = 0$$

を得る．この波動方程式によって，新座標系に関する系の変化が与えられる．確かにこれは方程式 (78) と形式的に同じものである．それゆえ，ディラック方程式は整時座標系の変換に関して確かに形式上不変であり，波動関数の変換法則は (85) によって与えられる．

行列 Λ は定数を除いて定まり，一般にはユニタリとなるように選ぶことができない．しかし

$$\Lambda^{\dagger} = \gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0} \tag{86}$$

が成り立つように定数を定めることはいつでもできる．このとき Λ は位相を除いて定められる．

実際，$\Omega^{\mu}{}_{\rho}$ は実であり，γ^{μ} はユニタリであって，その結果 (75) を満たすから，関係 (83) とそのエルミート共役をくらべることにより，

$$\hat{\gamma}^{\mu\dagger} = \gamma^{0}\hat{\gamma}^{\mu}\gamma^{0}$$

が得られる．(84) のエルミート共役をとり，上の関係を代入すれば，簡単な計算をいくらか行なったのち，

$$\hat{\gamma}^{\mu} = (\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0})\gamma^{\mu}(\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0})^{-1}$$

を得る．これを (84) とくらべればわかるように，行列 $\Lambda\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0}$ は4個の行列 γ^{μ} と交換するから，単位行列の定数倍である．すなわち，

$$\Lambda^{\dagger} = c\gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0}. \tag{87}$$

定数 c は必ず正の実数であることを示そう．(87) と (84) から，

$$\Lambda^{\dagger}\Lambda = c\gamma^{0}(\Lambda^{-1}\gamma^{0}\Lambda) = c(\Omega^{0}{}_{0} + \sum_{k}\Omega^{0}{}_{k}\gamma^{0}\gamma^{k})$$

が導かれ，(72) を考えに入れると，$\mathrm{Tr}\,\Lambda^{\dagger}\Lambda = 4c\,\Omega^{0}{}_{0}$ となる．ところで定符号エルミート行列 $\Lambda^{\dagger}\Lambda$ の跡は必ず正の実数である．$\Omega^{0}{}_{0}$ も同様であるから，c についても同じことが成り立つ．そこで Λ に $\sqrt{c}$ を掛ければ，こうしてできた新しい行列も行列 Λ の一つであり，(86) を満たす． (証明終)

波動関数の変換を定める法則 (85) から，随伴関数の変換法則

$$\overline{\Psi}' \equiv \Psi'^{\dagger}\gamma^{0} = \Psi^{\dagger}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0} = \overline{\Psi}\gamma^{0}\Lambda^{\dagger}\gamma^{0}$$

が導かれ，性質 (86) を考えに入れると，

$$\overline{\Psi}'(x') = \overline{\Psi}(x)\Lambda^{-1} \tag{88}$$

となる．

この変換法則を使えば，読者も容易に確かめられるであろうが，随伴方程式 (64) 自体も整時の座標変換に関して不変である．

連続の方程式も形式的に不変であることの証明が残っている．そのためには，j^μ（定義(65)）が反変4元ベクトルのように変換されることを示せばいっそう良い (10).

このことは容易に確かめられる．実際，性質 (85)，(88)，(84) から導かれるように，

$$j'^\mu(x')\equiv(\overline{\Psi}'\gamma^\mu\Psi')=(\overline{\Psi}\Lambda^{-1}\gamma^\mu\Lambda\Psi)=\Omega^\mu{}_\rho(\overline{\Psi}\gamma^\rho\Psi)=\Omega^\mu{}_\rho j^\rho(x).$$

ローレンツ変換の一つ一つに対して，条件 (84) と (86) により Λ が位相を除いて定められる．いまのところ，この位相は物理的意味をもたない．Λ の全体が整時ローレンツ群に準同型 (*) な群をつくるという性質を保ちながら，位相の任意さをできるだけ完全に取り除くとつごうがよい（ここで第15章，§8の議論をほとんどそのまま繰り返すことができる）．

さて，$\Omega^\mu{}_\nu$は実であるから，条件 (84) により，

$$\Omega^\mu{}_\nu\gamma^{\nu*}=(\Lambda^*)^{-1}\gamma^{\mu*}\Lambda^*$$

が得られ，ユニタリ行列 B（定義は (76)）を導入すれば，

$$\Omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu=(B\Lambda^*B^\dagger)^{-1}\gamma^\mu(B\Lambda^*B^\dagger)$$

となる．この等式を (84) とくらべると，$B\Lambda^*B^\dagger\Lambda^{-1}$ は4個の行列 γ^μ と交換することが確かめられ，したがって単位行列の定数倍になる．容易にわかるように——たとえば det $(B\Lambda^*B^\dagger\Lambda^{-1})$ を計算すれば——この定数は位相因数である．言いかえると，

$$\Lambda^*=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}B^\dagger\Lambda B.$$

Λ は位相因数を除いて定められるのであるから，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}=1$ が成り立つように位相因数を選ぶことがいつでも可能である．今後はこのように選ぶ．このとき Λ は符号を除いて決められる．

要約すれば，整時ローレンツ変換の一つ一つに符号の反対な二つの行列 Λ が対応し，つぎの三つの条件によって定められる：

$$\Omega^\mu{}_\nu\gamma^\nu=\Lambda^{-1}\gamma^\mu\Lambda \tag{89a}$$

$$\Lambda^\dagger=\gamma^0\Lambda^{-1}\gamma^0 \tag{89b}$$

$$\Lambda^*=B^\dagger\Lambda B. \tag{89c}$$

このように定められた行列 Λ の全体が群をつくり，この群が整時ローレンツ群に準同型であることは明らかである．§12でわかるように，Λ の定義に現われる符号の任意さを取り除くことはできない．そうしようとすれば，Λ が群をつくるという性質が失われるので

(10) このことが言えないと，波動関数の規格化が座標系の選び方に関係し，j^0 を存在確率の密度と解釈することが正当化されなくなるであろう．

(*) ［訳注］ 第2巻297頁を参照．群 $\mathcal{G}$ から群 $\hat{\mathcal{G}}$ への全射準同型写像が存在するとき，“$\mathcal{G}$ は $\hat{\mathcal{G}}$ に準同型” というのが著者の言葉使いである．

ある (11).

§ 12.　固有群に属する変換

等式 (89) によって定められる行列 Λ を具体的につくってみよう．この § 12 では，固有群に属する変換に限定する．

まず無限小変換を考える．6 個の無限小《回転》$g_{\mu\nu} - \varepsilon Z^{(\alpha\beta)}_{\mu\nu}$ の一つ一つに，行列 $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)$ が一つ対応し，これは単位行列に近いから，

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon) \simeq I + \mathrm{i}\varepsilon S_{\alpha\beta} \tag{90}$$

という形に書き表わすことができる．このとき $S_{\alpha\beta}$ は一つの有限な行列であるが，これを決めることが残されている．まず

$$[\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varepsilon)]^{-1} \simeq \Lambda^{(\alpha\beta)}(-\varepsilon) \simeq I - \mathrm{i}\varepsilon S_{\alpha\beta}.$$

そこで性質 (89a) から，

$$-\varepsilon g^{\mu\nu} Z^{(\alpha\beta)}_{\nu\rho} \gamma^{\rho} = -\mathrm{i}\varepsilon[S_{\alpha\beta}, \gamma^{\mu}]$$

を得る．(17) を考えに入れると，

$$[S_{\alpha\beta}, \gamma^{\mu}] = \mathrm{i}(\delta^{\mu}{}_{\beta}\gamma_{\alpha} - \delta^{\mu}{}_{\alpha}\gamma_{\beta}).$$

各 γ^{μ} に対して，$S_{\alpha\beta}$ は行列 $\mathrm{i}\gamma_{\alpha}\gamma_{\beta}/2$ と同じ交換関係を満たすことに注意する．その結果，差は 4 個の行列 γ^{μ} と交換する．すなわち定数である．容易にわかるように，条件 (89b) と (89c) はこの定数が 0 のときに限って満たされる．便宜上

$$\sigma_{\mu\nu} \equiv \frac{1}{2}\mathrm{i}[\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}] \equiv \mathrm{i}\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} \qquad (\mu \neq \nu) \tag{91}$$

と置けば，

$$\boxed{S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}} \tag{92}$$

---

(11) 条件 (89c) の代りに，もっと一般なつぎの条件を採用することもできる．すなわち，η を個々のローレンツ変換によって決まる定数とし，$\Lambda^{*} = \eta B^{\dagger}\Lambda B$ とするのである．Λ が群をつくるという性質が保たれるのは η の全体がローレンツ群の可換表現をつくるときである．したがって固有群の変換 $\mathcal{L}_0$ に対しては必ず $\eta = 1$ となり，条件 (89c) にもどる．反転型の変換，すなわち $s\mathcal{L}_0$ 部分の変換に対してはつぎの二つの場合が起こりうる：

a)　すべての $s\mathcal{L}_0$ に対して $\eta = 1$, (89c) にもどる．

b)　すべての $s\mathcal{L}_0$ に対して $\eta = -1$, すなわち $\Lambda^{*} = -B\Lambda B^{\dagger}$.

η のとりうるこれら二つの値は，粒子によって異なる**固有偶奇性** (parité intrinséque) に対応する．すなわち，$\eta = +1$ のときこの粒子は偶，$\eta = -1$ のとき奇と呼ばれる．いまのところ，固有偶奇性という概念は物理的意味をまったくもたない．しかし，異なる固有偶奇性をもついくつかの粒子の相互作用を調べるとき，場の量子論においてその物理的意味が生じる．

を得る.

行列 $S_{\alpha\beta}$ と $\sigma_{\alpha\beta}$ によって表わされる演算子を示すにも同じ記号 $S_{\alpha\beta}$, $\sigma_{\alpha\beta}$ を使う. あとでわかるように, $S_{\alpha\beta}$ は反対称テンソル演算子（6成分）であって, 粒子の固有角運動量すなわちスピンを表わす. 厳密には, この演算子の空間部分(3成分)がスピンである. $S_{\alpha\beta}$ はつぎの関係によって §6 と 7 の演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ と $\boldsymbol{\alpha}$ に結びつけられる：

$$S_{10}=\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_x,\qquad S_{20}=\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_y,\qquad S_{30}=\frac{1}{2}\mathrm{i}\alpha_z,\tag{93a}$$

$$S_{23}=\frac{1}{2}\sigma_x,\qquad S_{31}=\frac{1}{2}\sigma_y,\qquad S_{12}=\frac{1}{2}\sigma_z.\tag{93b}$$

固有ローレンツ群に属する有限な変換はいずれも, ひき続いて行なわれた無限小変換の積とみなされる. それゆえ, いま定義した無限小変換行列の積をとることによって, 有限な座標変換に対応する行列 Λ をつくることができる. このように処理すれば, 条件(89b)と（89c）は自動的に満たされ, 求める二つの行列 Λ のうちの一つが得られる.

特に, $x^\alpha x^\beta$ 平面のなかの角 φ の《回転》は, この平面内の無限小回転行列の積である. したがって, この変換を表わす行列 $\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varphi)$ は

$$\Lambda^{(\alpha\beta)}(\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi S_{\alpha\beta}}.\tag{94}$$

たとえば（注 (4) を参照), x 軸方向に速度 $v=\tanh\varphi$ をもつ特殊ローレンツ変換については, 関係（93a）と α_x の性質を考えに入れると,

$$\Lambda^{(xt)}(\varphi)=\mathrm{e}^{-\alpha_x\varphi/2}=\cosh\frac{1}{2}\varphi-\alpha_x\sinh\frac{1}{2}\varphi\tag{95}$$

を得る.

もっと一般に, 速度 $\boldsymbol{v}$ をもつ特殊ローレンツ変換に対応する行列を $\Lambda_{\mathrm{sp.}}(\boldsymbol{v})$ で表わせば,

$$\boldsymbol{u}\equiv\boldsymbol{v}/v,\qquad \varphi=\tanh^{-1}v$$

と置くとき,

$$\Lambda_{\mathrm{sp.}}(\boldsymbol{v})=\cosh\frac{1}{2}\varphi-(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{u})\sinh\frac{1}{2}\varphi$$

を得る.

$$b\equiv 1/\sqrt{1-v^2}=\cosh\varphi\tag{96}$$

と置けば, 上の式は簡単な計算によってつぎのような形に書き直される：

$$\Lambda_{\mathrm{sp.}}(\boldsymbol{v})=\frac{1}{\sqrt{2(1+b)}}[1+b-(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{v})b].\tag{97}$$

今度は普通の意味における回転を考える. Oz のまわりの回転に対しては(94)により,

$$\Lambda^{(xy)}(\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S_{12}\varphi}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_z\varphi/2}=\cos\frac{1}{2}\varphi+\mathrm{i}\sigma_z\sin\frac{1}{2}\varphi\tag{98}$$

を得る．

もっと一般に，単位ベクトル $\boldsymbol{u}$ に平行な軸のまわりの角 φ の回転に対する行列 $\Lambda_{\boldsymbol{u}}(\varphi)$ は

$$\Lambda_{\boldsymbol{u}}(\varphi)=\cos\frac{1}{2}\varphi+\mathrm{i}\sigma_{\boldsymbol{u}}\sin\frac{1}{2}\varphi, \tag{99}$$

ただし

$$\sigma_{\boldsymbol{u}}\equiv(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{u})$$

である．

ここで，ディラック方程式によって記述される粒子のスピンについて論じておこう．スピンは，空間の回転に関する内部変数の変換の性質によって定められる．(99) は回転による内部変数の変換の行列を一般の形に表わしている．この表わし方と第13章の式 (84) による表わし方のあいだにある違いは，$\sigma_{\boldsymbol{u}}$ の前の符号だけである．また，これら二つの行列の一方から他方に移るには，φ を $-\varphi$ に変えればよい．言いかえると，両者は互いに逆である．この違いは，第13章においてわれわれは軸を固定し，変数と状態の回転を考えたのに対して，ここでは逆の見方をとっていることに由来する．こう考えれば，回転によってディラックの波動関数はスピン 1/2 の 1 粒子の波動関数のように変換されることがわかる．

特に，任意の軸のまわりの 2π の回転によって単位行列が得られないことに注意する．実際，半整数スピンに特有の性質

$$\Lambda_{\boldsymbol{u}}(2n\pi)=(-)^{n}I \tag{100}$$

が成り立つのである．この事実から明らかなように，Λ が群をつくるという性質を傷つけることなく，Λ につける符号の任意さを取り除くことはできない．

ディラックの理論における波動関数を今後は**スピノール**と呼ぶ．

§ 13. 空間の反転と整時群

固有座標変換に関するスピノールの変換法則を決めた以上，任意の整時座標変換に関する変換法則を決めるためには，反転 s に関する変換法則を知ればよい．

座標系の反転 s に対応する行列を Λ_s で表わす．この場合，法則 (85) は

$$\Psi'(t,\boldsymbol{r})=\Lambda_s\Psi(t,-\boldsymbol{r}) \tag{101}$$

と書かれる．条件 (89a) から，

$$\Lambda_s^{-1}\gamma^0\Lambda_s=\gamma^0,\qquad \Lambda_s^{-1}\gamma^k\Lambda_s=-\gamma^k,$$

これから

$$\Lambda_s=c_s\gamma^0$$

を得る．定数 c_s は二つの条件 (89b) と (89c) によって定められ，結果は

$$c_s = \pm 1.$$

したがって

$$\Lambda_s = \pm \gamma^0. \tag{102}$$

Λ_s は上に述べたとおり，符号を除いて定められる ([12]).

§14. 共変量の構成

スピノール $\Psi(x)$ とその随伴スピノール $\overline{\Psi}(x)$ の成分を使って，Ψ と $\overline{\Psi}$ に関する双線形形式をつくれば，全部で16個の線形独立なものが得られ，いずれも x^0, x^1, x^2, x^3 の関数である．テンソルとしてはっきり決まった性格によって，これらをつぎの五つの領域にまとめる：スカラー S，ベクトル V^μ，2階の反対称テンソル $T^{[\mu\nu]}$，3階の反対称テンソルすなわち擬ベクトル $A^{[\lambda\mu\nu]}$，4階の反対称テンソルすなわち擬スカラー P. これらは20・2表に与えられる．

20・2表　Ψ と $\overline{\Psi}$ に関する双線形テンソル

テンソルの表わし方	成分の数	性　格
$S(x) \equiv (\overline{\Psi}\Psi)$	1	スカラー
$V^\mu(x) \equiv (\overline{\Psi}\gamma^\mu\Psi)$	4	ベクトル
$T^{[\mu\nu]}(x) \equiv (\overline{\Psi}\gamma^\mu\gamma^\nu\Psi) \quad (\mu \neq \nu)$	6	2階のテンソル
$A^{[\lambda\mu\nu]}(x) \equiv (\overline{\Psi}\gamma^\lambda\gamma^\mu\gamma^\nu\Psi) \quad (\lambda \neq \mu, \mu \neq \nu, \nu \neq \lambda)$	4	擬ベクトル
$P(x) \equiv (\overline{\Psi}\gamma^5\Psi)$	1	擬スカラー

上に述べたテンソルとしての性格を証明するのは容易である．そのためには，スピノール Ψ と $\overline{\Psi}$ の変換法則（式 (85) と (88)) のほか，行列 Λ とそれに対応するローレンツ変換の係数 $\Omega^\mu{}_\nu$ とのあいだの関係を定めた式 (89a) を使えばよい．

擬スカラーの変換法則がスカラーのそれと異なるのは，補助因数として $\det(\Omega^\mu{}_\nu)$ が現われる点だけであることを思い出しておく．すなわち

$$P(x') = \det(\Omega^\mu{}_\nu) P(x).$$

それゆえ擬スカラー場は固有ローレンツ変換によってスカラー場のように変換されるが，反転 s によって符号を変える．同じように，擬ベクトルの変換法則がベクトルのそれと異なるのも，補助因数 $\det(\Omega^\mu{}_\nu)$ が現われる点だけである．

すでに定めたように，ベクトル $V^\mu(x)$ は流れの密度を表わす4元ベクトルと同じである．すなわち

([12]) 注 ([11]) で定めた用語によれば，(102) によって与えられる Λ_s は固有偶粒子に対するものである．固有奇粒子に対しては $\Lambda_s = \pm i\gamma^0$ を得る．

$$V^{\mu}(x) \equiv j^{\mu}(x).$$

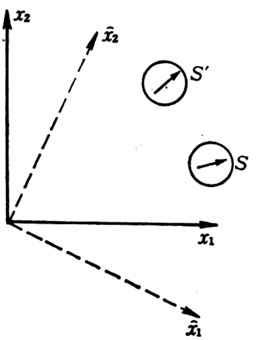
他の共変量もまたそれぞれ解釈できるものである．たとえば，$T^{[\mu\nu]}$ は定数を除いてテンソル $S^{\mu\nu}$ に等しく，これはスピンの密度と同一視される．すなわち

$$T^{[\mu\nu]} = -2\mathrm{i}\,S^{\mu\nu}(x) \equiv -2\mathrm{i}(\overline{\Psi}\,S^{\mu\nu}\Psi).$$

§15. 形式の不変性に対するもう一つの定式化．状態の変換

これまではいつも座標軸を動かす操作として各変換を取り扱い，物理系は変形しなかった．これと反対に，物理系の方に変換を施し，軸を固定しておくこともできる．第二の見方は第3部で統一的に採用したものである（この問題については特に第13章，§11の注意を参照）．得られる結果は異なる言葉で言い表わされるにせよ，これら二つの見方が同値であることはきわめて明らかである．

この同値性を明確に述べるために，座標〔軸の〕系 (R) に関しスピノール $\Psi(x)$ で表わされる物理系の状態を (S) で示す．(S) に変換 $\mathcal{L}$ を施して得られる状態を (S') とし，同じ変換によって (R) に変換される座標系を $(\hat{R})$ とする（20·1図を参照）．すなわち，



20·1図 一つのローレンツ変換に対する二つの見方．すなわち，座標系の変更 $(\hat{x} \to x)$ と物理系の変換 $(S \to S')$．

$$(S') = \mathcal{L}(S), \qquad (\hat{R}) = \mathcal{L}^{-1}(R).$$

ここでつぎの三つのスピノールを考える：

座標系 (R) に関して (S) を表わす $\Psi(x)$，

座標系 $(\hat{R})$ に関して (S) を表わす $\hat{\Psi}(\hat{x})$，

座標系 (R) に関して (S') を表わす $\Psi'(x)$．

独立変数が等しい値をとるとき，二つのスピノール $\hat{\Psi}$ と Ψ' が等しいことは明らかである．すなわち

$$\Psi'(x) = \hat{\Psi}(x). \tag{103}$$

$\hat{\Psi}$ と Ψ のあいだには，§11で対応がつけられている．変換 $\mathcal{L}$ によって $(\hat{R})$ から (R) へ移るのであるから，$\mathcal{L}$ に対応する行列をつねに Λ と書くことにし，(85)を適用すれば，

$$\Psi(\hat{x}) = \Lambda\hat{\Psi}(\mathcal{L}^{-1}\hat{x})$$

を得る．したがって，

$$\Psi'(x) = \Lambda^{-1}\Psi(\mathcal{L}x). \tag{104}$$

(85)とくらべればわかるように，座標系を動かしたときと逆の操作によって状態の変換が行なわれている．

ディラック粒子が運動する電磁場についても同じことが言える．この場を (A) で表わ

し，変換 $\mathcal{L}$ によって (A) から導かれる場を (A') とする．すなわち

$$(A') = \mathcal{L}(A).$$

ここでつぎの三つの（共変）4元ベクトルを考える：

座標系 (R) に関して (A) を表わす $A_\mu(x)$
座標系 $(\hat{R})$ に関して (A) を表わす $\hat{A}_\mu(\hat{x})$
座標系 (R) に関して (A') を表わす $A'_\mu(x)$.

スピノールに対して上に述べた議論はここでも繰り返される．明らかに

$$A'_\mu(x) = \hat{A}_\mu(x). \tag{105}$$

一方，(81) により，

$$\hat{A}_\mu(\mathcal{L}^{-1}x) = A_\nu(x)\Omega^\nu{}_\mu,$$

したがって

$$A'_\mu(x) = A_\nu(\mathcal{L}x)\Omega^\nu{}_\mu. \tag{106}$$

いま，$\Psi(x)$ がポテンシャル $A_\mu(x)$ のなかでディラック方程式

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0 \tag{107}$$

を満たしているとする．(103) と (105) を考えに入れると，座標変換 $(R)\to(\hat{R})$ に関するディラック方程式の形式不変性から，

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - eA'_\mu) - m]\Psi' = 0 \tag{108}$$

を得る．それゆえ形式不変の性質はつぎのように言い表わされる：

$\Psi(x)$ がポテンシャル $A_\mu(x)$ のなかでディラック方程式を満たすとき，Ψ から変換 $\mathcal{L}$ によって導かれる状態 $\Psi'(x)$ は，変換されたポテンシャル $A'_\mu(x)$ のなかでディラック方程式を満たす．

§16. 変化の法則が不変であるための条件

方程式 (107) と (108) は一般に異なる．これらが同じになるのは，外部のポテンシャル (A) が変換 $\mathcal{L}$ に関して不変であるとき，すなわち

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x)$$

のときである．この場合，Ψ と Ψ' は同じ波動方程式にしたがう．それゆえ，力学的状態の変化の法則は，外部のポテンシャルを保存する任意の変換 $\mathcal{L}$ に関して不変である．

いままでの議論ではいつでも $\mathcal{L}$ は任意の整時ローレンツ変換であった．しかしこれまで述べてきたことはすべて空間と時間の並進についても繰り返される（注[9]を参照）．上に述べたばかりの二つの性質——形式不変性と変化の法則が不変であるための条件——は，$\mathcal{L}$ が空間または時間の並進を表わすときにもそのまま成り立つ．

§17. 変換演算子．運動量．角運動量．偶奇性

このような解析を第15章で説明した一般的な構図にしたがって進めるために，変換法則（104）を

$$\Psi' = T\Psi \tag{109}$$

の形に書くとつごうがよい．ここで T はある適当な線形演算子である．このとき，変換に関するディラック方程式の形式不変性は，演算子間の関係

$$T\mathcal{D}(A)T^{-1} = \mathcal{D}(A') \tag{110}$$

によって表わされる．このなかで，$\mathcal{D}(A)$，$\mathcal{D}(A')$ はそれぞれポテンシャル A，A' のなかのディラック演算子を表わす．その定義はつぎのとおりである：

$$\mathcal{D}(A) \equiv \gamma^{\mu}(\mathrm{i}\partial_{\mu} - e\,A_{\mu}). \tag{111}$$

このとき，変換 $\mathcal{L}$ に関して変化の法則が不変であるための条件は交換関係

$$[T, \mathcal{D}(A)] = 0 \tag{112}$$

によって表わされる．

演算子 T をつくることはやさしい．これはスピン変数だけに作用する演算子 $T^{(s)}$ と軌道変数だけに作用する演算子 $T^{(0)}$ との積である．すなわち

$$T = T^{(s)} \otimes T^{(0)}.$$

（109）と（104）をくらべれば，特に

$$T^{(s)} = \Lambda^{-1} \tag{113}$$

であることがわかる．§11 で定義された行列 Λ によって表わされる演算子をここでは Λ と書く．

われわれにとって重要なのは，ローレンツの無限小並進と《回転》，および反転 s に対して T の式を求めることである．

並進の場合は $T^{(s)} = 1$ である．微分演算子

$$\boxed{p_{\mu} \equiv \mathrm{i}\partial_{\mu}} \tag{114}$$

を導入しよう．p_{μ} はエネルギー－運動量4元ベクトル（もっと正確にはこの4元ベクトルの共変成分）を表わす．x^{α} 軸方向に ε だけ動かす無限小並進に対しては，

$$T = 1 - \mathrm{i}\varepsilon\, p_{\alpha}$$

を得る．

つぎに，$x^{\alpha}x^{\beta}$ 平面内で角 ε だけまわす《無限小回転》を考える．この場合には，

$$(\mathcal{L}x)^{\mu} = x^{\mu} - \varepsilon Z^{(\alpha\beta)\mu}{}_{\nu}x^{\nu} = x^{\mu} - \varepsilon(\delta^{\mu}{}_{\alpha}x_{\beta} - \delta^{\mu}{}_{\beta}x_{\alpha})$$

となる．スピノール $\Psi(x)$ の一つの成分を $\psi_s(x)$ とするとき，ε に関する1次の項まで

とれば，明らかに

$$\psi_s(\mathcal{L}x) \simeq \psi_s(x) + \varepsilon\left(x_\alpha \frac{\partial\psi_s}{\partial x^\beta} - x_\beta \frac{\partial\psi_s}{\partial x^\alpha}\right)$$

が成り立つ．そこで微分演算子

$$L_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha \tag{115}$$

を導入すれば，上の式は

$$\psi_s(\mathcal{L}x) \simeq (1 - \mathrm{i}\varepsilon L_{\alpha\beta})\psi_s(x)$$

という形に書き表わされる．他方 (90) と (113) から，

$$T^{(s)} \simeq 1 - \mathrm{i}\varepsilon S_{\alpha\beta}$$

が導かれ，$S_{\alpha\beta}$ は (92) によって定義されている．結局，スピノールの変換法則を与える式 (109) は《無限小回転》の場合，

$$\Psi'(x) \simeq (1 - \mathrm{i}\varepsilon S_{\alpha\beta})(1 - \mathrm{i}\varepsilon L_{\alpha\beta})\Psi(x) \simeq (1 - \mathrm{i}\varepsilon J_{\alpha\beta})\Psi(x)$$

と書き表わされ，

$$\boxed{J_{\alpha\beta} \equiv L_{\alpha\beta} + S_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha p_\beta - x_\beta p_\alpha + \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}} \tag{116}$$

である．

$J_{\alpha\beta}$ の空間3成分 J_{23}，J_{31}，J_{12} はそれぞれ軸 Ox，Oy，Oz のまわりの無限小回転に結びつけられる．それゆえこれらは全角運動量 $\boldsymbol{J}$ の成分であり，

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}, \qquad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}, \qquad \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{117}$$

が成り立つ．

$\boldsymbol{L}$ の成分は軌道変数だけに作用する．すなわち $\boldsymbol{L}$ は軌道角運動量である．$\boldsymbol{S}$ の成分は内部変数だけに作用する．すなわち $\boldsymbol{S}$ は粒子のスピンベクトルである．

$\boldsymbol{J}$，$\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{S}$ が角運動量に特有の交換関係を満たし，$\boldsymbol{S}$ がスピン 1/2 の1粒子に特有の性質

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{3}{4}$$

をもつことは読者みずから確かめられるであろう．

空間の反転に結びついた演算子 T を P で表わし，偶奇性（パリティ）と呼ぶ．《軌道偶奇性》の演算子を $P^{(0)}$ で表わす．すなわち

$$P^{(0)}\Psi(t, \boldsymbol{r}) = \Psi(t, -\boldsymbol{r})$$

とする．条件 (113) により，P に対しては符号の異なる二つの式から一つを選ぶ余地がある．これらの式は §13 の研究から容易に導き出される（関係 (102) を参照）．われわれ

は最も便利なものとして，

$$\boxed{P = \gamma^0 P^{(0)}} \tag{118}$$

を採用する．P がエルミートで $P^2 = 1$ であることに注意しておく．

§18. 保存法則と運動の定数

変換が時刻によって変わるときには，その変換に結びついた演算子 T によって，Ψ は時間を直接に含む関数となる．特殊な場合として，時間方向の並進や特殊ローレンツ変換に対してこのことが起こる．

これに反して，時間を含まない任意の変換に対しては，T が作用する状態ベクトルの変化の法則とは無関係に，T の作用が定められる．このとき T が系の状態とオブザーバブルに対する変換の演算子として定められるということは，第15章（第II節）の場合と同様である．そして状態の変化の法則が不変であるという性質は，保存法則の形に表わされる．

実際，$\mathcal{L}$ が空間の変換であるならば，T は反転，無限小並進および無限小回転の関数，すなわち P，$\boldsymbol{J}$，および $\boldsymbol{p}$ の関数である．したがって T は γ^0 と交換する．そして

$$\gamma^0\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} - H_D\right) \equiv \mathcal{D}(A) - m$$

であるから，交換関係（112）はこの場合条件

$$[T, H_D] = 0$$

に同値である．それゆえ，この関係は第15章 §12の条件に帰着し，そこでハミルトニアンの対称性と保存法則との関係について述べたことはすべて今の場合にもあてはまる．

たとえば，並進による $A_\mu(x)$ の不変性から交換関係

$$[\boldsymbol{p}, H_D] = 0$$

と運動量の保存が導き出される．$A_\mu(x)$ が球対称ならば，

$$[\boldsymbol{J}, H_D] = 0$$

と全角運動量の保存が得られる．$A_\mu(x)$ が原点に関する反転によって不変ならば，

$$[P, H_D] = 0$$

が成り立ち，偶奇性が保存される．

§19. 時間反転と荷電共役変換

この §19 では，二つの反線形演算，時間反転と荷電共役変換に関するディラック方程式の形式不変性を証明する．これら二つの問題を明らかにするためには，状態空間の反ユ

ニタリ演算子を導入するとぐあいがよい．この演算子の一般的性質はごく簡明である．これを K で表わす [13].

反ユニタリ演算子 K

これは $\boldsymbol{p}$ を $-\boldsymbol{p}$ に変え，$\boldsymbol{r}$ と γ^μ を保存する反ユニタリ変換の演算子として定義される．すなわち，

$$K\boldsymbol{r}K^\dagger = \boldsymbol{r}, \qquad K\boldsymbol{p}K^\dagger = -\boldsymbol{p}, \tag{119}$$

$$K\gamma^\mu K^\dagger = \gamma^\mu \qquad (\mu = 0, 1, 2, 3). \tag{120}$$

このような演算子が存在し，位相を除いて定まり，つぎの性質をもつことを示そう：

$$K^2 = -1. \tag{121}$$

K が存在すれば，これが位相を除いて定まることは，関係 (119)，(120) のほか，基底演算子 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$，γ^μ に関して状態空間が既約であるという事実から出てくる．そこで特殊な表現，たとえばディラック表現を選ぶ．このとき各演算子 γ^μ はある行列 γ_D^μ で表わされる．γ_D^μ をそれぞれの複素共役に変換する《B 行列》を考え，これによって表わされる演算子を B_D と書く．ここでは B_D を全空間の（ユニタリ）演算子とみなし，スピン空間だけの演算子とみなさない．これは $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{p}$ と交換するユニタリ演算子である．この表現に結びついた複素共役演算子（第15章，§5の定義）を K_D とする．関係 (76) から

$$\gamma^\mu = B_D(K_D\gamma^\mu K_D^\dagger)B_D^\dagger$$

が得られる．したがって反ユニタリ演算子

$$K \equiv B_D K_D$$

は関係 (120) を満たす．B_D は $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{p}$ と交換し，K_D の定義そのものにより

$$K_D\boldsymbol{r}K_D = \boldsymbol{r}, \qquad K_D\boldsymbol{p}K_D = -\boldsymbol{p}$$

が成り立つから，K は関係 (119) をも満たす．最後に，$K_D = K_D^\dagger$ であるから，性質 (77) により

$$B_D(K_D B_D K_D) \equiv K^2 = -1$$

が得られる．すなわち性質 (121) である．K にどのような位相因数を掛けてもこれが成り立つことは明らかである．　(証明終)

荷電共役変換

方程式 (107) の両辺に左から K を掛け，K が γ^μ，∂_μ，$A_\mu(x)$ と交換することを利用すれば，

$$[\gamma^\mu(-\mathrm{i}\partial_\mu - eA_\mu(x)) - m]K\Psi(x) = 0 \tag{122}$$

(13) この演算子が時間反転演算子でないことに注意する．後者はのちに K_T と書き表わされる．

を得る．それゆえ，$K\Psi$ の満たす波動方程式とディラックの波動方程式との違いは，$+\mathrm{i}$ が $-\mathrm{i}$ に置き換えられている点だけである．両辺に γ^5 を掛けてみよう．この演算子は γ^μ と反交換し，左辺の括弧内に現われる γ^μ 以外の演算子とは交換するから，

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu + eA_\mu(x)) - m]\gamma^5 K\Psi(x) = 0 \tag{123}$$

となる．ここで

$$\boxed{K_C \equiv \gamma^5 K} \tag{124}$$

$$\Psi^C(x) = K_C \Psi(x) \tag{125}$$

と置けば，方程式 (123) は

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu + eA_\mu(x)) - m]\Psi^C(x) = 0 \tag{126}$$

と書き表わされる．波 $\Psi^C(x)$ を支配する方程式と波 $\Psi(x)$ を支配する方程式は電荷の符号だけが違う．それゆえ，$\Psi(x)$ がポテンシャル $A_\mu(x)$ 内にある質量 m，電荷 e のディラック粒子の変化を表わすとき，$\Psi^C(x)$ は同じポテンシャル $A_\mu(x)$ 内にある同じ質量 m，反対電荷 $(-e)$ のディラック粒子の変化を表わす．

スピノール Ψ と Ψ^C は互いに荷電共役であると言い，変換 K_C を**荷電共役変換**と呼ぶ．Ψ と Ψ^C のあいだの対応はまた相反的である．実際，K と γ^5 の性質から

$$K_C^2 = 1 \tag{127}$$

は容易に導き出される．

荷電共役変換が並進および整時ローレンツ変換と交換することは容易に示される．もっと詳しく言うと，このような変換の一つによって Ψ が $L\Psi$ に変換されるとすれば，変換が並進または固有ローレンツ変換のとき $L\Psi$ の荷電共役は $L\Psi^C$，変換が反転のとき $-L\Psi^C$ である（問題5を参照）．

時間反転

時間反転によるディラック方程式の不変性は直接に証明されるが，荷電共役に関する上記の結果から出発するのも簡明である．

与えられたポテンシャル $A_\mu(t, \boldsymbol{r})$ は運動するいくつかの電荷によって生じる．これから時間反転によって導き出されるポテンシャル $A'_\mu(t, \boldsymbol{r})$ を得るには，これらの電荷の運動を逆にすればよい．この操作によって電流，したがって磁場は符号を変える．これに対して電荷，したがって電場はもとのままである．すなわち，

$$\mathcal{H}'(t, \boldsymbol{r}) = -\mathcal{H}(-t, \boldsymbol{r}), \qquad \mathcal{E}'(t, \boldsymbol{r}) = \mathcal{E}(-t, \boldsymbol{r}).$$

したがって A_μ は 擬ベクトルのように変換される．すなわち

$$\boldsymbol{A}'(t, \boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{A}(-t, \boldsymbol{r}), \qquad A'_0(t, \boldsymbol{r}) = A_0(-t, \boldsymbol{r}).$$

それゆえ方程式 (126) のなかの t を $-t$ に変えれば，

$$[-\gamma^0(\mathrm{i}\partial_0 - eA'_0(t,\boldsymbol{r})) + \sum_k \gamma^k(\mathrm{i}\partial_k - eA'_k(t,\boldsymbol{r})) - m]\Psi^C(-t,\boldsymbol{r}) = 0$$

となる．両辺に $\gamma^5\gamma^0$ を掛けると，この演算子は γ^0 と反交換し，γ^k と交換するから，

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\partial_\mu - eA'_\mu(t,\boldsymbol{r})) - m]\Psi'(t,\boldsymbol{r}) = 0 \tag{128}$$

となる．ただしここでは

$$\Psi'(t,\boldsymbol{r}) \equiv \gamma^5\gamma^0\Psi^C(-t,\boldsymbol{r}) = \gamma^0 K\Psi(-t,\boldsymbol{r}) \tag{129}$$

と置いている．

時間反転の（反線形）演算子

$$\boxed{K_T \equiv \gamma^0 K} \tag{130}$$

を導入する．

$\Psi'(t,\boldsymbol{r})$ をスピノール $\Psi(-t,\boldsymbol{r})$ の時間反転による変換(像)と定義する．これは方程式 (128) を満たす．したがって，Ψ がポテンシャル A_μ のなかでディラック方程式を満たすならば，その時間反転による変換 Ψ' は，A_μ から時間反転によって導かれるポテンシャル A'_μ のなかでディラック方程式を満たす．

特に A_μ が時間反転によって不変であるとき(たとえば，この粒子が定常な純電場 $\boldsymbol{A} = 0, \partial A_0/\partial t = 0$ のなかにあるとき)，Ψ と Ψ' はまったく同じディラック方程式にしたがう．

γ^0 と K の性質から，

$$K_T^2 = -1 \tag{131}$$

が導かれる．半整数角運動量をもつ系に特有なこの結果は，非相対論的な場合にもすでに得られている (第 15 章 (88))．そこで導き出された諸結果，特にクラーマースの縮退はここでもそのまま成り立つ．

B_D を ρ と σ の関数として表わす式 (§10 の終りを参照) に置き換えれば，定義の関係式 (124) と (130) から，これと同値な関係

$$K_C = \mathrm{i}\rho_2\sigma_y K_D, \qquad K_T = \mathrm{i}\sigma_y K_D$$

が容易に導かれる．これらはディラック表現において演算子 K_C と K_T を取り扱うときに役立つ．

§20.　ゲージ不変

参考までにゲージ不変の性質について述べ，補足とする (第 21 章，§20 を参照)．

電磁ポテンシャルのゲージを変えるというのは，その成分 $A_\mu(x)$ を

$$A'_\mu(x) \equiv A_\mu(x) - \partial_\mu G(x) \tag{132}$$

に置き換えることである．ここで $G(x)$ は時空間座標の関数から任意に選んでよいから

$$A'_0 = A_0 - \frac{\partial G}{\partial t}, \qquad \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla G$$

を得る．このような変換で電場と磁場は不変である．

ポテンシャル A_μ のなかのディラック方程式の解を $\Psi(x)$ とすれば，

$$\Psi'(x) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}eG(x)}\Psi(x) \tag{133}$$

がポテンシャル A'_μ のなかのディラック方程式の解であることは明らかである．これがディラック方程式のゲージ不変の性質である．

IV. 演算子の解釈と簡単な解

§21. ディラック方程式と対応原理

ディラック方程式の解は，電磁場が0でないとき，クライン＝ゴルドン方程式とは異なるけれども対応原理を満たす2階の方程式にしたがう．

この方程式をつくるために，共変形式 (50) から出発し，左辺に演算子 $(-\mathrm{i}\gamma^\lambda D_\lambda - m)$ を作用させた結果を0と置く．すなわち

$$[\gamma^\lambda\gamma^\mu D_\lambda D_\mu + m^2]\Psi = 0. \tag{134}$$

演算子 γ^μ の代数的性質から，

$$\gamma^\lambda\gamma^\mu \equiv g^{\lambda\mu} + \frac{1}{2}[\gamma^\lambda, \gamma^\mu] \tag{135}$$

が導かれる．一方では黙り添字の付けかえだけから，

$$[\gamma^\lambda, \gamma^\mu]D_\lambda D_\mu \equiv -[\gamma^\lambda, \gamma^\mu]D_\mu D_\lambda = \frac{1}{2}[\gamma^\lambda, \gamma^\mu][D_\lambda, D_\mu] \tag{136}$$

を得る．ところで，演算子 D_μ の定義（式 (10)）によれば，

$$[D_\lambda, D_\mu] \equiv \mathrm{i}e[\partial_\lambda, A_\mu] + \mathrm{i}e[A_\lambda, \partial_\mu] \equiv \mathrm{i}e\left(\frac{\partial A_\mu}{\partial x^\lambda} - \frac{\partial A_\lambda}{\partial x^\mu}\right) \equiv \mathrm{i}eF_{\lambda\mu}. \tag{137}$$

(135)，(136)，(137) から，

$$\gamma^\lambda\gamma^\mu D_\lambda D_\mu \equiv D_\mu D^\mu + eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu} \tag{138}$$

が得られる．ここで $S^{\lambda\mu}$ は粒子のスピンを表わす（定義 (92)）．したがって方程式 (134) は

$$[D_\mu D^\mu + eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu} + m^2]\Psi = 0 \tag{139}$$

という形に書き表わされる．

クライン＝ゴルドン方程式を (30′) の形でくらべると，異なるところは

$$eS^{\lambda\mu}F_{\lambda\mu} \tag{140}$$

という項が現われることである．これは粒子のスピンと電磁場とのあいだの相互作用を表

わす項である．この項には古典的類似物がなく，この項の寄与は古典近似が成り立つ条件のもとでは無視できる．このときディラック波束の運動はクライン＝ゴルドン波束の運動と同じである．

§22. ディラック粒子の力学変数

われわれは機会あるごとに，ディラック理論におけるいくつかの力学変数に対して物理的解釈を与えてきた．この問題をもっと系統的な形でもう一度取り上げ，特に §4 で述べたいろいろな古典量に対応する量子論の変数を示そう．

以下の議論では，この理論の相対論的不変性は本質的な役割をまったく演じない．ここで採用する見地は非相対論的量子力学の場合と同じである．すなわち，系はいくつかの力学変数の集合を与えることによって定められ，これらの変数ははっきり決まった代数演算にしたがい，ディラック方程式——ディラックによる形式（式 (36) と (44)）——はシュレーディンガー表示における力学的状態の変化を定める方程式である．

それゆえ今後は，時刻を単なるパラメータとして取り扱い，空間座標は系の力学変数のなかに入れる．基底変数は $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$ および内部変数 $\boldsymbol{\alpha}$，β である．ここでも表現の理論はすべてそのまま適用される．特に，ディラック表現では，状態ベクトル $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle, \cdots$ を表わす波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}), \Phi(\boldsymbol{r}), \cdots$ が4成分をもち，座標 x，y，z の関数である．この表現における内積 $\langle\Phi|\Psi\rangle$ は，内部自由度を表わす添字がとりうる4個の値に関する和と，座標 x，y，z の全空間における積分として定められる．すなわち，

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_{s=1}^{4}\int \varphi_s^*(\boldsymbol{r})\psi_s(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

このように内積を定めれば，§6 で述べた存在確率密度の定義（式 (35)）とのあいだに矛盾を生じない．もっと一般に，今の場合も理論の統計的解釈，本書の第1部で説明したような解釈をそのまま採用することができる．特に，系の状態を一つ与えたとき，演算子 Q の平均値は，この状態を表わすノルム1のケットベクトルを $|u\rangle$ とすれば，

$$\langle Q\rangle = \langle u|Q|u\rangle$$

となる．

この理論におけるオブザーバブルのうちでも，内部自由度に関係のないものについては，いつでも物理的解釈は明白である．特にあげれば，

$\boldsymbol{r}$： 位置ベクトル

$\boldsymbol{p}$： 運動量（ラグランジュの運動量）

$\boldsymbol{\pi} \equiv \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$： 運動量（狭義の運動量）．

$\boldsymbol{r}$ の関数のなかには，演算子

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

すなわち，固有値 $\boldsymbol{r}_0$ に対する固有空間への射影子が現われる．これは点 $\boldsymbol{r}_0$ における存在確率密度を表わす．

内部自由度に依存するオブザーバブルのなかから，特につぎのものを定義する [14]：

$$\text{エネルギー：}\quad H\equiv e\varphi+\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi}+\beta m \tag{141}$$

$$\text{相対論的質量：}\quad M\equiv H-e\varphi\equiv\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi}+\beta m \tag{142}$$

$$\boldsymbol{r}_0\ \text{における流れの密度：}\quad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\equiv\boldsymbol{\alpha}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0) \tag{143}$$

$$\text{全角運動量：}\quad \boldsymbol{J}\equiv(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{144}$$

$$\text{スピン：}\quad \boldsymbol{S}\equiv\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{145}$$

$$\text{偶奇性：}\quad P\equiv\beta P^{(0)}. \tag{146}$$

H と M の定義は古典力学との対応に基づく．$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)$ の定義は連続の方程式に由来する．$\boldsymbol{J}$ と $\boldsymbol{S}$ の定義は回転による状態の変換に，P の定義は反転による変換に結びついている．

最後に，対応原理の示すところによって，われわれは $\boldsymbol{\alpha}$ を粒子の速度と解釈する．この解釈はまた流れの密度を表わす式からも想像される．このことを明確にするため，古典の式 (18)，(19)，(21) を対応する量子論の式とくらべる．この比較を行なうには，当然ハイゼンベルク表示へ移らなければならない．（ハイゼンベルク表示の）変数 $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{\pi}$ のハイゼンベルク方程式はそれぞれ

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t=-\mathrm{i}[\boldsymbol{r},H],\qquad \mathrm{d}\boldsymbol{\pi}/\mathrm{d}t=-\mathrm{i}[\boldsymbol{\pi},H]+\partial\boldsymbol{\pi}/\partial t$$

と書かれる．右辺の H と $\boldsymbol{\pi}$ にそれぞれ上の定義式を代入し，演算子 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{\alpha}$，β の交換あるいは反交換の規則を使えば，かなり長いけれども実際にはむずかしくない計算によって，

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t=\boldsymbol{\alpha} \tag{147}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\pi}/\mathrm{d}t=e(\boldsymbol{\mathcal{E}}+\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{\mathcal{H}}) \tag{148}$$

を得る（問題６）．

他方，M を表わす式 (142) と $\boldsymbol{\alpha}$ の性質を使えば，等式

$$\boldsymbol{\pi}=\frac{1}{2}(M\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}M) \tag{149}$$

が導かれる．$\boldsymbol{\alpha}$ を古典速度 $\boldsymbol{v}$ と同一視すれば，ハイゼンベルク表示の力学変数のあいだに成り立つ等式 (147)，(148)，(149) は，古典力学変数のあいだの等式 (18)，(21)，(19)

---

[14] 運動量 $\boldsymbol{p}$ がゲージの選び方によって変わることに注意する．系全体（粒子＋電磁場）の運動量だけがこの選び方によらない．同じ注意はエネルギー H および角運動量 $\boldsymbol{J}$ にも当てはまる（第 21 章，§23 を参照）．

とそれぞれ同じになる．

速度 $\boldsymbol{\alpha}$ の成分は互いに交換しないこと，また各成分は全部で二つの固有値 $+c$ と $-c$ (われわれの単位では $+1$ と -1) をもつことに注意する．ここに原理上の困難はすこしもないが，この現象についてつくられる古典的なイメージをあまり文字どおりにとってはならないという注意だけを付け加えておく．§37 でこの点に立ち返る．

§23.　自由電子．平面波

この節の残りでは，ディラック方程式の解を調べる．まず場がない場合，ついで中心力による静ポテンシャル内にある場合を取り扱う．この場合，ディラック方程式を解くことは，ハミルトニアン H_D の固有解を求めることと同値である．特に断わらない限り，計算はすべてディラック表現に関して行なわれ，§7 で導入した演算子 ρ_1，ρ_2，ρ_3 および σ_x，σ_y，σ_z をしばしば利用するであろう．

まず場が 0 であるとする．このときハミルトニアン H_D は運動量の 3 成分と交換する．それゆえ，運動量のはっきり決まった値 $\boldsymbol{p}$ に対応する H_D の固有解をつくってみよう．これらは平面波，すなわち

$$u(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$$

の形をした関数であって，$u(\boldsymbol{p})$ は $\boldsymbol{r}$ に無関係な 4 成分をもつスピノールである．それは固有値方程式

$$Hu(\boldsymbol{p}) = Eu(\boldsymbol{p}) \tag{150}$$

によって決められ，H は空間 $\mathcal{E}^{(s)}$ の演算子

$$H \equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m \equiv \rho_1(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) + \rho_3 m \tag{151}$$

である．

簡単な計算により，

$$H^2 = p^2 + m^2.$$

それゆえ H のとりうる固有値は符号の異なる二つの値 $\pm\sqrt{p^2+m^2}$，すなわち

$$E = \varepsilon E_p \qquad (\varepsilon = \pm 1), \qquad E_p = \sqrt{p^2+m^2} \tag{152}$$

だけである．容易に示されるように——たとえば ρ_2 が H と反交換することを使えばよい——これら二つの値は 2 重に縮退している．

他方，運動量方向のスピン成分 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}/2p$ は H と交換する．この性質は式 (151) の第 3 辺からすぐにわかる (これに反して，スピンの他の成分は H と交換しない)．それゆえ，H と $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}/2p$ に共通な固有解を求めることが問題になり，固有値の組が 4 個得られる．すなわち

$$\left(+E_p, +\frac{1}{2}\right),\quad \left(+E_p, -\frac{1}{2}\right),\quad \left(-E_p, +\frac{1}{2}\right),\quad \left(-E_p, -\frac{1}{2}\right)$$

である．これらの一つ一つにそれぞれただ一つの固有状態が対応する．二つの固有値方程式から出発して，固有スピノールは容易につくられる．このスピノールをつくるもう一つの方法がつぎの §24 で説明されよう．20·3表により，$\boldsymbol{p}$ が z 軸方向を向いている特に簡単な場合について，（1に規格化された）4個のスピノールの成分が与えられている．ディラック表現においては，β と σ_z が対角行列によって表わされることを思い出そう．

20·3表　ディラック表現において $\boldsymbol{p}\equiv(0,0,p)$ の波に対応するスピノールの成分 $(E_p=\sqrt{m^2+p^2})$.

エネルギー $E=$	正 $+E_p$		負 $-E_p$	
スピン $\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{2p}\equiv\frac{1}{2}\sigma_z$	↑ $+\frac{1}{2}$	→ $-\frac{1}{2}$	↑ $+\frac{1}{2}$	→ $-\frac{1}{2}$
$\left(\frac{2E_p}{E_p+m}\right)^{1/2}\times$ $u_1=$	1	0	$-\frac{p}{E_p+m}$	0
$u_2=$	0	1	0	$\frac{p}{E_p+m}$
$u_3=$	$\frac{p}{E_p+m}$	0	1	0
$u_4=$	0	$-\frac{p}{E_p+m}$	0	1
四つのスピノールは1に規格化されている：$u^\dagger u=1$				

§24.　ローレンツ変換による平面波の構成

$A_\mu=0$ のとき，ディラック方程式の解にローレンツ変換を施せば，つねに同じ方程式の解が得られる．特に運動量 $\boldsymbol{p}$ の平面波はすべて運動量0の平面波からローレンツ変換によって導き出される．この注意に基づいて，§23のスピノール $u(\boldsymbol{p})$ をつくる方法を示そう．

運動量が0のとき，方程式（150）は

$$\beta m u(0)=E u(0)$$

と書かれる．これがとりうる固有値は $+m$ と $-m$ の二つである．固有値 $\varepsilon m(\varepsilon=\pm 1)$ にスピノール $u^{(\varepsilon)}(0)$ が対応する．これは演算子 β の固有ベクトルである．これは1に規格化されているとし，スピンの方向は任意に固定する．このとき $u^{(\varepsilon)}(0)$ は位相因数を除いて定められる．

ところで，平面波

$$\Psi_0^{(\varepsilon)}=u^{(\varepsilon)}(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon mt}$$

は運動量 0 とエネルギー εm，すなわちエネルギー－運動量 4 元ベクトル $(\varepsilon m, 0)$ に対応するディラック方程式の解である．

これまでの座標系に対して速度 $\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{p}/\varepsilon\sqrt{m^2+p^2} = -\boldsymbol{p}/\varepsilon E_p$ で動く座標系をとり，上記の解を考える．新座標系に関して，粒子のエネルギー－運動量は

$$p^{\mu} \equiv (\varepsilon E_p, \boldsymbol{p}) \tag{153}$$

であり，解は平面波

$$\begin{aligned}\Psi_{\boldsymbol{p}}^{(\varepsilon)} &= \Lambda_{\text{sp.}}(\boldsymbol{v})\, u^{(\varepsilon)}(0) \exp(-\mathrm{i} p^{\mu} x_{\mu}) \\ &= [\Lambda_{\text{sp.}}(\boldsymbol{v})\, u^{(\varepsilon)}(0)] \exp[-\mathrm{i}(\varepsilon E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]\end{aligned}$$

によって表わされる．それゆえ，括弧のなかの項は，われわれがつくろうとしているスピノール $u(\boldsymbol{p})$ の一つ――今後はこれを $u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p})$ と書こう――に比例する．そのノルムは，この状態に結びついた流れの密度 4 元ベクトルの時間成分であり，これは $u^{(\varepsilon)}(0)$ に結びついた流れの密度 4 元ベクトルからローレンツ変換によって導かれる．それゆえこれは

$$b \equiv \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} = \frac{E_p}{m}$$

に等しい．そこで

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) \equiv b^{-1/2} \Lambda_{\text{sp.}}(\boldsymbol{v})\, u^{(\varepsilon)}(0)$$

という定義を採用する．

この式に (97) と上に示した $\boldsymbol{v}$ および b の値を代入すれば，求める式

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) = [2E_p(m+E_p)]^{-1/2}[m + E_p + \varepsilon(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})]\, u^{(\varepsilon)}(0) \tag{154}$$

を得る．特に $u^{(\varepsilon)}(0)$ が $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})$ の固有状態ならば，$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p})$ も同様であり，その結果 §23 で定めたスピノールの一つになる．特に $\boldsymbol{p}$ が z 軸方向を向くときには 20・3 表の結果がもう一度得られる．

(154) はまたつぎの形にも書き表わされる：

$$u^{(\varepsilon)}(\boldsymbol{p}) = [2E_p(m+E_p)]^{-1/2}[m + \gamma^{\mu} p_{\mu}]\, u^{(\varepsilon)}(0). \tag{155}$$

このなかで p_{μ} は (153) によって定められるエネルギー－運動量 4 元ベクトルを表わす．

§25. 中心力ポテンシャル

中心力による静ポテンシャル $V(r)$ のなかにあるディラック粒子の固有解を求めよう．この場合，ディラックのハミルトニアンは

$$H_D \equiv \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \beta m + V(r) \tag{156}$$

である．これは回転と反転によって不変である．すなわち

$$[H_D, \boldsymbol{J}] = 0, \quad [H_D, P] = 0.$$

それゆえ決まった角運動量と偶奇性をもつ固有解を求める．

解 Ψ をつぎの形に書くとつごうがよい：

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{157}$$

ただし

$$\Phi \equiv \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \qquad \chi \equiv \begin{pmatrix} \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix}. \tag{158}$$

部分空間 $\beta = +1$ と $\beta = -1$ に Ψ を射影すれば,

$$\frac{1}{2}(1+\beta)\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \frac{1}{2}(1-\beta)\,\Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \tag{159}$$

を得る. Φ と χ は r および z 軸方向のスピン成分 μ の関数である. これらはまた動径変数 r および《角変数》(θ, φ, μ) の関数とも考えられる. この点についてはパウリ理論における波動関数とまったく同様である.

さて, Ψ は $\boldsymbol{J}^2$, J_z, P に共通な固有関数であるとする. 角運動量を固定する量子数を (JM) で表わす. 偶奇性については, 量子数 ϖ を

$$\varpi = \begin{cases} +1 & (\text{偶奇性}\ (-)^{J+1/2}\ \text{の状態に対して}) \\ -1 & (\text{偶奇性}\ (-)^{J-1/2}\ \text{の状態に対して}) \end{cases} \tag{160}$$

と定め, これで目じるしを付けるとつごうのよいことがわかる. このとき仮定により,

$$\boldsymbol{J}^2 \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = J(J+1)\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \qquad J_z \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = M\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}, \qquad P^{(0)}\begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = (-)^{J+\varpi/2}\begin{pmatrix} \Phi \\ -\chi \end{pmatrix} \tag{161}$$

を得る. スピン 1/2 と L 位の球面調和関数との結合によってつくられた全角運動量 (JM) の関数を $\mathcal{Y}_{LJ}^{M}(\theta, \varphi, \mu)$ とする. これは偶奇性 $(-)^L$ をもつ関数である. 角運動量の結合規則により, L は二つの値, すなわち

$$L = l \equiv J + \frac{1}{2}\varpi, \qquad L = l' \equiv J - \frac{1}{2}\varpi \tag{162}$$

しか取りえない. そして二つの関数 $\mathcal{Y}_{lJ}^{M}$ と $\mathcal{Y}_{l'J}^{M}$ は反対の偶奇性をもつ. 前者は偶奇性 $(-)^{J+\varpi/2}$, 後者は偶奇性 $(-)^{J-\varpi/2}$ である. (161) により, Φ は $(r, \theta, \varphi, \mu)$ の関数で角運動量 (JM) と偶奇性 $(-)^{J+\varpi/2}$ をもつ. それゆえ必ず r の関数と $\mathcal{Y}_{lJ}^{M}$ の積に等しい. 同じような議論によって示されるように, χ は r の関数と $\mathcal{Y}_{l'J}^{M}$ の積に等しい.

要約すれば, $\Psi_{\varpi J}^{M}$ によって角運動量 (JM) と偶奇性 $(-)^{J+\varpi/2}$ をもつ状態を表わすとき,

$$\Psi_{\varpi J}^{M} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} F\,\mathcal{Y}_{lJ}^{M} \\ \mathrm{i}G\,\mathcal{Y}_{l'J}^{M} \end{pmatrix} \tag{163}$$

という形に書き表わすことができる. ただし l と l' は (162) によって与えられ, F と

G は r の任意の関数である.

ここで固有値問題

$$H_D \Psi^M_{\varpi J} = E \Psi^M_{\varpi J} \tag{164}$$

を解いてみよう．そのためには，演算子 H_D のなかで《角》変数と動径変数を分離するとつごうがよい．これから述べる方法は第9章の方法とまったく類似のものである．

動径運動量 p_r と《動径速度》α_r をつぎのように導入する：

$$p_r \equiv -\mathrm{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r \tag{165}$$

$$\alpha_r \equiv (\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}) = \rho_1(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r. \tag{166}$$

第13章の等式 (83) から，

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}) = rp_r + \mathrm{i}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})$$

が導き出される．この式に左から α_r/r を掛け，明白な性質 $\alpha_r^2 = 1$ を使えば，等式

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}) \equiv \alpha_r\left(p_r + \frac{\mathrm{i}}{r}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\right) \tag{167}$$

を得る．演算子 $1+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})$ を調べると，

$$1+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}) = \boldsymbol{J}^2 + \frac{1}{4} - \boldsymbol{L}^2$$

が容易に示される．(163) を吟味すれば明らかなように，$\Psi^M_{\varpi J}$ に対する $\boldsymbol{L}^2$ の作用は演算子

$$\left(J+\frac{1}{2}\varpi\beta\right)\left(J+\frac{1}{2}\varpi\beta+1\right) \equiv J(J+1)+\frac{1}{4}+\frac{1}{2}\varpi\beta(2J+1)$$

の作用と同じである．したがって，

$$(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\Psi^M_{\varpi J} = -\frac{1}{2}\varpi(2J+1)\beta\Psi^M_{\varpi J}. \tag{168}$$

(167) と (168) を代入すれば，方程式 (164) は

$$\left[\alpha_r\left(p_r - \frac{\mathrm{i}\varpi(J+(1/2))}{r}\beta\right) + m\beta + V(r)\right]\Psi^M_{\varpi J} = E\Psi^M_{\varpi J}$$

という形に書き表わされる．

固有関数をその表示式 (163) に，p_r と α_r をそれぞれの定義式 (165) と (166) に置き換え，等式（問題8を参照）

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\mathcal{Y}^M_{lJ} &= -\mathcal{Y}^M_{l'J}\\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\mathcal{Y}^M_{l'J} &= -\mathcal{Y}^M_{lJ}\end{aligned} \tag{169}$$

を使えば，上の方程式から動径関数 $F(r)$ と $G(r)$ に関する二つの微分方程式が一組にな

って導き出される．すなわち

$$\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\varpi(J+(1/2))}{r}\right]G=(E-m-V)F \qquad (170a)$$

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\varpi(J+(1/2))}{r}\right]F=(E+m-V)G. \qquad (170b)$$

この動径方程式がここで演じる役割は，非相対論的理論における第9章の方程式（20）の役割に当たる．

$\Psi_{\varpi J}^{M}$ のノルムは，角に関する積分を済ませると，つぎの式で与えられる：

$$\langle\Psi_{\varpi J}^{M}|\Psi_{\varpi J}^{M}\rangle=\int_0^\infty(|F|^2+|G|^2)\mathrm{d}r. \qquad (171)$$

これは第9章の式（21）と比較される．

関数 F と G が正則であるための条件についても，非相対論的理論において $y_l(r)$ が正則であるための条件について論じたときとまったく同様な議論ができるが，ここでは詳細に立ち入らない．

§26. 自由球面波

$V=0$ のときは §25 の方法により，決まった角運動量と偶奇性をもつ自由電子のディラック方程式に対する定常解が得られる．これがディラックの自由球面波である．

この場合は方程式（170b）から，

$$G=\frac{1}{E+m}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\varpi(J+(1/2))}{r}\right]F \qquad (172)$$

を得る．この式を方程式（170a）に代入すれば，

$$\begin{aligned}(E^2-m^2)F&=\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\varpi(J+(1/2))}{r}\right]\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{\varpi(J+(1/2))}{r}\right]F\\&=\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{(J+(1/2))(J+\varpi+(1/2))}{r^2}\right]F\end{aligned}$$

となる．容易に確かめられるように，

$$\left(J+\frac{1}{2}\right)\left(J+\varpi+\frac{1}{2}\right)=l(l+1)$$

が成り立ち，l は（162）によって定められる整数である．したがって，上の方程式の (E^2-m^2) を $2m$ と非相対論的エネルギーの積に置き換えれば，この方程式は非相対論的理論における自由波の動径方程式と同じものになる．これは (E^2-m^2) の任意の正の値に対して正則な解をただ一つだけもつ．さらに，

$$k=\sqrt{E^2-m^2} \qquad (|E|\geqslant m)$$

と置けば，この方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] F = 0$$

と書かれる.

この正則解は（定数を除いて定まり）

$$F = r\, j_l(kr)$$

である.

対応する関数 G をこれから導き出すには関係 (172) を適用する. 付録 B の漸化式 (42) と (43) を［どちらも $\gamma = 0$ と置き, 前者を $\varpi = 1$ の場合に, 後者を $\varpi = -1$ の場合に］使えば,

$$G = \frac{\varpi k}{E + m} r\, j_{l'}(kr)$$

を得る.

要約すれば, 区間 $(-m, +m)$ の外部にある任意のエネルギーの値 E に対して, 角運動量 (JM) と偶奇性 $(-)^{J+\varpi/2}$ をもつ自由球面波が一つ存在し, これを (163) の形式で書けば,

$$\text{定数} \times \begin{pmatrix} |E+m|^{1/2} j_l(\sqrt{E^2 - m^2}\, r)\, \mathcal{Y}_{lJ}^M \\ \mathrm{i}\varpi\varepsilon\, |E-m|^{1/2} j_{l'}(\sqrt{E^2 - m^2}\, r)\, \mathcal{Y}_{l'J}^M \end{pmatrix}, \tag{173}$$

ただし $\varepsilon = E/|E|$ である.

§27. 水素原子

第2の例として, 原子核のクーロン場のなかにある電子の束縛状態を求めよう. 核は電子の電荷の $(-Z)$ 倍に等しい点電荷であって, 原点に固定されているものとして取り扱う [15]. それゆえ, 中心力ポテンシャル

$$V = -Ze^2/r$$

のなかにあるディラック粒子の束縛状態を求めることが問題になる. この固有値問題は厳密に解くことができる. ここでは解法の大筋を示しておく. それは第11章 §4 に説明した方法の簡単な拡張である.

動径方程式系 (170) の解の漸近的挙動を調べれば明らかなように, E は区間 $(-m, +m)$ のなかに含まれていなければならない. 固有値 E に対して, 原点で正則な解が $\exp(-\sqrt{m^2 - E^2}\, r)$ の漸近的挙動をもつとき, これらの値が求める固有値である.

---

[15] このことは, 核が無限に重いと想定している. その結果として生じる誤差は, 相対論的効果と同じ程度の大きさになるから無視することはできない. しかし電子の質量 m をすべて換算質量に置き換えれば, 誤差はほとんど補正される.

$$\kappa = \sqrt{m^2 - E^2}, \qquad \nu = \sqrt{\frac{m-E}{m+E}}, \tag{174}$$

$$\zeta = Ze^2, \qquad \tau = \varpi\left(J + \frac{1}{2}\right) \tag{175}$$

と置き，変数

$$\rho \equiv \kappa r \tag{176}$$

を導入する．方程式系 (170) は

$$\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \frac{\tau}{\rho}\right)G = \left(-\nu + \frac{\zeta}{\rho}\right)F \tag{177a}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \frac{\tau}{\rho}\right)F = \left(\nu^{-1} + \frac{\zeta}{\rho}\right)G \tag{177b}$$

に同値である．

求める解を

$$F(\rho) = \rho^s \mathrm{e}^{-\rho}(a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \cdots) \qquad (a_0 \neq 0) \tag{178a}$$

$$G(\rho) = \rho^s \mathrm{e}^{-\rho}(b_0 + b_1\rho + b_2\rho^2 + \cdots) \qquad (b_0 \neq 0) \tag{178b}$$

の形にとる．この展開を方程式 (177) に代入し，同じ次数の項を順に等しいと置けば，方程式の列が得られる．その最初の方程式によって s が定められ，以下の方程式によって係数 $a_0, b_0, a_1, b_1, \cdots, a_n, b_n, \cdots$ が漸化的に決められる．s に関する方程式は反対符号の 2 根 $\pm\sqrt{\tau^2 - \zeta^2}$ をもつが，F と G が原点における正則条件 $F(0) = G(0) = 0$ を満たすためには，$s > 0$ が必要十分であるから，正の根だけを残さなければならない (16)．すなわち

$$s = \sqrt{\tau^2 - \zeta^2}.$$

それゆえ E の値の一つ一つに，原点で正則な解が一つ対応する．一般にこの解は無限遠で $\rho^s \mathrm{e}^{\rho}$ の挙動を示し，例外は二つの展開式 (178) が有限個の項しか含まない場合である．このことは E がいくつかの特別な値をとるときしか起こらない．これが求めるエネルギー準位である．計算の結果を示せば，これらの準位は

$$m\left[1 + \frac{\zeta^2}{(n' + s)^2}\right]^{-1/2}$$

という式で与えられる．n' は動径量子数であり，(178) に現われる多項式の次数に等しい．n' が任意の正の値をとるときは，ϖ の二つの値に対してそれぞれ一つずつ正則解が存在する．$n' = 0$ のときは，$\varpi = -1$ に対しては正則解が一つ存在するが，$\varpi = +1$ に

(16) われわれは $\zeta < |\tau|$，すなわち $Ze^2 < (J + 1/2)$ と仮定する．$Z < 137$ のとき——実際に起こるのはこの場合であるが——上の条件はつねに満たされる．この条件が満たされなければ，原点における正則条件に関する議論は，ずっと微妙なものになるであろう．

対しては解がない．

主量子数

$$n = J + \frac{1}{2} + n'$$

を導入すれば，上記の結果をつぎのような形に言いなおすことができる．二つの量子数 n と J によって決まるとびとびのスペクトル準位は，公式

$$E_{nJ} = m\left[1 + \frac{Z^2 e^4}{(n - \varepsilon_J)^2}\right]^{-1/2} \tag{179}$$

$$\varepsilon_J = J + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 e^4} \tag{179'}$$

によって与えられ，n はすべての正の整数をとり，J は区間 $(0, n)$ に属するすべての半整数値をとることができる．すなわち

$$n = 1, 2, \cdots, \infty\,;\; J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \cdots, n - \frac{1}{2}.$$

〔n を決めておけば〕J の値の一つ一つに対して，$(2J+1)$ 個の解から成る列が二つ定まり，互いに反対の偶奇性をもつ．ただ $J = n - 1/2$ に対してだけは $(2J+1)$ 個の解から成る列が一つ定まり，その偶奇性は $(-)^{n-1}$ である．偶奇性を指定する代りに，l すなわちスピノールの初めの 2 成分の軌道角運動量を指定することもできる．スピノールの偶奇性が $(-)^l$ であることを思い出しておこう．

これらのいろいろな解の列を互いに区別するために，普通はスペクトル分析の記号 $n\,l_J$ を使う．つぎの表は最初の準位を大きさの順にいくつかあげたもので，各準位に対するスペクトル項を示す［各項の縮退の位数は $2J+1$ である］：

$n = 1$	$J = \frac{1}{2}$	$1s_{1/2}$			$(n' = 0)$
$n = 2$	$J = \frac{1}{2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$		$(n' = 1)$
	$J = \frac{3}{2}$		$2p_{3/2}$		$(n' = 0)$
$n = 3$	$J = \frac{1}{2}$	$3s_{1/2}$	$3p_{1/2}$		$(n' = 2)$
	$J = \frac{3}{2}$		$3p_{3/2}$	$3d_{3/2}$	$(n' = 1)$
	$J = \frac{5}{2}$			$3d_{5/2}$	$(n' = 0)$.

(179) を $Z^2 e^4$ のべき級数に展開すれば，

$$E_{nJ} = m\left[1 - \frac{Z^2 e^4}{2n^2} - \frac{(Z^2 e^4)^2}{2n^4}\left(\frac{n}{J + (1/2)} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right]$$

を得る．第 1 項は質量の項である．第 2 項 $-Z^2 e^4/2n^2$ は非相対論的理論から予想される

量と厳密に等しい．第3項以下は相対論的補正を与える．これらの項の効果により，非相対論的理論における準位の《偶然の縮退》が部分的に取り除かれる．n を決めておけば，各項の結合エネルギー $m-E$ がわずかに増加する．この増加量は J だけによって定まり，J が小さいほど明確に現われる．

水素原子と水素類似原子（特に He^+）の微細構造についてわれわれがもっている実験的データは，この予想と実質的に一致している．

しかしながら，この一致もまったく完全なものではない．この不一致は水素原子の準位 $n=2$ の微細構造において最も明瞭に観察される [17]．非相対論近似において，三つの準位 $2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}$ はすべて等しい．ディラックの理論によれば，準位 $2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ はやはり等しいけれども，準位 $2p_{3/2}$ はわずかに高い（分離の大きさは 10^{-4} eV の程度である）．分離 $2p_{3/2}-2p_{1/2}$ はこの理論による予想とよくあう．しかしながら，準位 $2s_{1/2}$ は準位 $2p_{1/2}$ よりわずかに高く，分離 $2s_{1/2}-2p_{1/2}$ は分離 $2p_{3/2}-2p_{1/2}$ の約10分の1である．この効果はラム効果という名で知られている．これを説明するためには，電子，陽子および量子化された電磁場のあいだの相互作用を厳密に取り扱う必要がある．ディラックの理論では，この相互作用のうち主な項であるクーロン・ポテンシャルだけを残している．ラム効果はこの近似に対する《輻射補正》を表わす [18]．

V．ディラック方程式の非相対論的極限

§28. 小さい成分と大きい成分

正のエネルギーをもつ平面波を考えよう．その成分は20・3表に示されている．エネルギー E_p は静止エネルギーとすこししか違わないこと，すなわち

$$W \equiv E_p - m \ll m$$

であることを仮定する．これは非相対論的近似のための条件である．実際，この場合には運動エネルギー W がほとんど $mv^2/2$ に等しく，さらに

$$\frac{W}{m} \simeq \frac{1}{2}v^2 \ll 1$$

が成り立つ．

このとき $\beta=+1$ に対応する0でない成分は他の成分よりもはるかに大きいことが確

---

(17) W. E. LAMB と R. C. RETHERFORD, *Phys. Rev.*, **72** (1947), 241.

(18) 分離 $2s_{1/2}-2p_{1/2}$ に対する最新の測定によれば，1057.77 ± 0.10 Mc/s (Mc/s ≡ メガサイクル/秒) が得られている．量子電気力学によって予想される《輻射補正》を考慮したときに得られる理論値は 1057.99 ± 0.2 Mc/s である (C. M. SOMMERFIELD, *Phys. Rev.*, **107** (1957), 328).

かめられる．すなわち，

$$\sigma_z = +1 \text{ に対しては} \qquad \frac{u_3}{u_1} = \left(\frac{W}{W+2m}\right)^{1/2} \simeq O\left(\frac{v}{c}\right) \ll 1,$$

$$\sigma_z = -1 \text{ に対しては} \qquad \frac{u_4}{u_2} = -\left(\frac{W}{W+2m}\right)^{1/2} \simeq O\left(\frac{v}{c}\right) \ll 1.$$

自由球面波（式（173）を参照）あるいは水素原子の固有関数（特に問題10で定義される特殊な固有解を参照）についても同じような事実が観察される．このことから，非相対論近似においてはスピノール Ψ の成分のうち，β の固有値 -1 に対応する成分 Ψ_3 と Ψ_4 の二つがきわめて小さいため無視できること，またこの条件の下でディラックの理論は2成分の理論に同値であることが予想される．

この点を明らかにするため，ディラックのスピノール Ψ を（157）の形に書き表わす．Φ と χ は（158）または（159）によって定められる．すでに §25 で注意したように，Φ と χ を2成分の非相対論的理論における状態空間のベクトルとみなすことができる．

この記法により，エネルギー E の定常状態に関するディラック方程式をディラックの形式とその表現を使って書けば，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}))\chi + (e\varphi + m)\Phi = E\Phi \tag{180a}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}))\Phi + (e\varphi - m)\chi = E\chi \tag{180b}$$

となる．ここで

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}, \qquad M = E - e\varphi,$$
$$W = E - m, \qquad M' = \frac{1}{2}(m+M) = m + \frac{1}{2}(W - e\varphi) \tag{181}$$

と置く．方程式（180b）を χ に関して解き，その結果を方程式（180a）に入れれば，順に

$$\chi = \frac{1}{2M'}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\Phi \tag{182}$$

$$\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\frac{1}{2M'}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) + e\varphi\right]\Phi = W\Phi \tag{183}$$

となる．方程式系（182），（183）はディラック方程式と厳密に同値である．

非相対論的極限において，

$$W, \ e\varphi, \ \boldsymbol{p}, \ e\boldsymbol{A} \ll m, \qquad M' \simeq m. \tag{184}$$

方程式（182）を調べれば明らかなように，

$$\chi \ll \Phi$$

が成り立ち，これら二つの量の比は p/m すなわち v/c の程度である．われわれは今後 χ と Φ をそれぞれ**小さい成分**および**大きい成分**と呼ぶ．

本節の残りを通じて，《**偶**》**演算子**と《**奇**》**演算子**を区別する必要がある．その定義はつ

ぎのとおりである：

i) 演算子 $\mathcal{P}$ の行列要素のうちに小さい成分と大きい成分を結びつけるものがないとき，$\mathcal{P}$ は《偶》である（例：$\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{J}, P(\boldsymbol{r}_0), \beta$）；

ii) 演算子 $\mathcal{I}$ の0でない行列要素がいずれも小さい成分と大きい成分を結びつけるとき，$\mathcal{I}$ は《奇》である（例：$\boldsymbol{\alpha}, \beta\boldsymbol{\alpha}, \gamma^5, \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)$）．

同じことであるが，$\mathcal{P}$ は β と交換する演算子であり，$\mathcal{I}$ は β と反交換する演算子である．すなわち，

$$\mathcal{P} = \beta\mathcal{P}\beta, \qquad \mathcal{I} = -\beta\mathcal{I}\beta. \tag{185}$$

任意の演算子 Q は《偶》演算子と《奇》演算子の和で表わされ，この分割は一意的である．すなわち，

$$Q = \frac{1}{2}[Q + \beta Q\beta] + \frac{1}{2}[Q - \beta Q\beta].$$

二つの《偶》演算子の積と二つの《奇》演算子の積はそれぞれ《偶》演算子である．《奇》演算子と《偶》演算子の積は《奇》演算子である．

§29. ディラック理論の非相対論的極限としてのパウリ理論

方程式系（182），（183）にもどる．小さい成分を無視すれば，波動関数の規格化条件に関して v^2/c^2 程度の誤差が生じる．方程式（183）のなかの演算子 M' を質量 m に置き換えても同じ程度の誤差が生じる．この近似では，方程式（183）が固有値方程式 (19)

$$H_{\mathrm{NR}}\Phi = W\Phi \tag{186}$$

の形をとり，そのハミルトニアン

$$H_{\mathrm{NR}} \equiv \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) + e\varphi \tag{187}$$

は2成分の波動関数 Φ に作用する．方程式 (186) によりエネルギー W が v^2/c^2 を除いて定められる．

H_{NR} をもっと見慣れた形に書き表わすために，第13章の等式（83）を適用しよう．この際，$\boldsymbol{\pi}$ の成分は互いに交換せず，したがって

$$\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\pi} = \mathrm{i}e\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \mathrm{i}e\,\boldsymbol{\mathcal{H}}$$

となることに注意する．計算の結果は

$$H_{\mathrm{NR}} \equiv \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A})^2 - \frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}) + e\varphi \tag{188}$$

---

(19) 厳密に言えば，方程式 (183) は固有値方程式ではない．左辺の括弧のなかにある演算子が M' を媒介として《固有値》W に依存するからである．

となり，質量 m，電荷 e，固有磁気モーメント

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_{\mathrm{B}} \boldsymbol{\sigma} \qquad (\mu_{\mathrm{B}} \equiv \text{ボーア磁子} \equiv e/2m)$$

の1粒子に対するパウリ理論のハミルトニアンがもう一度得られる．

ディラック理論は電子に対する固有磁気モーメントの存在を予言するばかりでなく，このモーメントの正確な値をも与える（第13章，§18）．ここにこの理論の大きな成果の一つがある ([20])．

いま考えている近似において，ディラック理論がパウリの2成分理論に同値であるためには，ディラック理論の演算子に対して，大きい成分だけに作用する演算子を対応させることができなければならない．

このような対応づけは実際に可能である．ただし，問題の演算子が状態 Ψ'，Ψ'' のあいだの行列要素としてだけ計算に現われ，これらの状態のエネルギーは正で静止質量のそれに十分近く，その結果として非相対論近似が適用されるという場合に限る．

偶演算子 $\mathcal{P}$ に関しては，行列要素 $\langle \Psi'' | \mathcal{P} | \Psi' \rangle$ が

$$\langle \Phi'' | \mathcal{P} | \Phi' \rangle + \langle \chi'' | \mathcal{P} | \chi' \rangle$$

の形に書き表わされる．この和の第2項は，他のことはすべて同じとして，第1項の $(v/c)^2$ 倍程度の大きさであり，ここで論じている近似では無視できる．それゆえ $\mathcal{P}$ は大きい成分が張る空間への射影によって置き換えられる．ディラック理論において $\mathcal{P}$ が表わす物理量をパウリの非相対論的理論においてはこの射影が表わす．

奇演算子 $\mathcal{I}$ に関しては，

$$\langle \Psi'' | \mathcal{I} | \Psi' \rangle = \langle \Phi'' | \mathcal{I} | \chi' \rangle + \langle \chi'' | \mathcal{I} | \Phi' \rangle$$

が成り立つ．右辺の各項に小さい成分が直接に入っている．しかしいま考えている近似では，方程式 (182) から

$$|\chi\rangle = \rho_1 \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi})}{2m} |\Phi\rangle$$

([20]) 実際には，電子の磁気モーメントに対するこの理論値にくらべて，実験値 $\mu_{\mathrm{exp.}}$ はわずかに違う (P. KUSCH と H. M. FOLEY, *Phys. Rev.*, **72** (1947), 1256)．最近の測定では

$$\varDelta \mu_{\mathrm{exp.}} \equiv \mu_{\mathrm{exp.}} - \mu_{\mathrm{B}} = (1.165 \pm 0.011) \times 10^{-3} \mu_{\mathrm{B}}$$

が得られている．量子電気力学から予見される《輻射補正》によれば，この異常磁気モーメントの存在が説明される．これによれば実際 (SOMMERFIELD, 前掲論文)

$$\varDelta \mu_{\mathrm{th.}} = 1.163 \times 10^{-3} \mu_{\mathrm{B}}.$$

ついでにつぎの注意を付け加えておく：ディラック演算子に $\kappa \mu_{\mathrm{B}} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$ の項を加えて得られる方程式も，ディラック方程式の不変性をすべてもっている．数値定数 κ にどのような値を与えてもこのことが言える．このような方程式により，質量 m，電荷 e，内部磁気モーメント $(1+\kappa)\mu_{\mathrm{B}}$ の粒子が記述される．

が得られ，その結果

$$\langle \Psi'' | \mathcal{I} | \Psi' \rangle = \frac{1}{2m} \langle \Phi'' | [\mathcal{I} \rho_1 (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) \rho_1 \mathcal{I}] | \Phi' \rangle$$

となる．それゆえ $\mathcal{I}$ は大きい成分が張る空間へ落とした演算子

$$\frac{1}{2m} [\mathcal{I} \rho_1 (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) \rho_1 \mathcal{I}]$$

の正射影に置き換えられる．

たとえば，《速度》 $\boldsymbol{\alpha} \equiv \rho_1 \boldsymbol{\sigma}$ は大きい成分が張る空間の演算子

$$\boldsymbol{\pi}/m \equiv [\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})\boldsymbol{\sigma}]/2m$$

に置き換えられる．

同様に，点 $\boldsymbol{r}_0$ における流れの密度

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0) \equiv \rho_1 \boldsymbol{\sigma} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$$

は大きい成分が張る空間の演算子

$$(\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0))_{\mathrm{NR}} \equiv \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{\sigma} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}}{2m} \right) + \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}}{2m} \right) \boldsymbol{\sigma} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$$

に置き換えられる．あるいはこれに第13章の等式 (83) を適用して，

$$(\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0))_{\mathrm{NR}} \equiv \boldsymbol{j}^{(\mathrm{I})} + \boldsymbol{j}^{(\mathrm{II})} \tag{189}$$

$$\boldsymbol{j}^{(\mathrm{I})} \equiv [\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{\pi} + \boldsymbol{\pi}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)]/2m \tag{190a}$$

$$\boldsymbol{j}^{(\mathrm{II})} \equiv \mathrm{i}[\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{\sigma}) - (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{\sigma})\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)]/2m \tag{190b}$$

を得る．それゆえこの極限において，ディラックの電流 $e\boldsymbol{j}$ は二つの項から成る．第1項すなわち $e\boldsymbol{j}^{(\mathrm{I})}$ はシュレーディンガー理論の流れと同じである（第4章，問題1を参照）．第2項を解釈するために，大きい成分 Φ' と Φ'' のあいだの行列成分を調べる．計算の結果は

$$\langle \Phi'' | e\boldsymbol{j}^{(\mathrm{II})} | \Phi' \rangle = \frac{e}{2m} \operatorname{rot} \langle \Phi'' | \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{\sigma} | \Phi' \rangle$$

となる．これは磁気流の項であり，量

$$\frac{e}{2m} \langle \Phi'' | \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{\sigma} | \Phi' \rangle \equiv \langle \Phi'' | \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \boldsymbol{\mu} | \Phi' \rangle$$

は磁気モーメントの密度と解釈される．この磁気モーメントの発散 (div) が 0 であり，その結果連続の方程式には何の寄与も与えないことに注意する．

§30.　応用：超微細構造と双極子相互作用

1原子による電場，すなわちある静電ポテンシャル $\varphi(r)$ によって表わされる場のなかにある電子を考え，核の磁気モーメント $\boldsymbol{M}$ によってつくられる場の効果を調べる．座標

の原点にある磁気双極子 $\boldsymbol{M}$ によってつくられる場は，ベクトル・ポテンシャル

$$\boldsymbol{A} \equiv (\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{r})/r^3 \tag{191}$$

$$\equiv \mathrm{rot}(\boldsymbol{M}/r) \tag{191'}$$

で表わすことができる．この場の存在は，ディラックのハミルトニアンにおける付加項 $-e(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A})$ によって表現される．

非相対論近似でこの場の効果を決めるために，前の §29 の方法によって演算子 $-e(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A})$ の非相対論的極限を計算することができる．また，$\boldsymbol{M}$ の存在によってパウリのハミルトニアン (188) にもたらされる変化を直接に調べてもよい．これら二つの方法は同値であるが，ここで採用するのは第二の方法である．

$\boldsymbol{M}$ について1次の項だけを残すことにすれば，パウリのハミルトニアンはつぎの二つの補足項を含む：

$$I_a = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})$$

$$I_b = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathcal{H}) = -(\boldsymbol{\mu}\cdot\mathcal{H}).$$

$\mathcal{H}$ はこの場合に双極子 $\boldsymbol{M}$ から生じる場である．

I_a はスピン－軌道相互作用（核のスピンと電子の軌道）の項である．実際，$\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} = 0$ は明らか（式 (191′) を参照）であるから，

$$I_a = -\frac{e}{m}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}).$$

この右辺に (191) を代入し，電子の軌道角運動量 $\boldsymbol{L} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ を導入すれば，

$$I_a = -e(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{L})/mr^3 \tag{192}$$

を得る．

I_b はスピン－スピン相互作用の項すなわち双極子相互作用の項である．これを計算するために，$\boldsymbol{A}$ を表わす式 (191′) を使えば，

$$I_b = -\boldsymbol{\mu}\cdot(\nabla \times \boldsymbol{A}) = -\boldsymbol{\mu}\left[\nabla \times \left(\nabla \times \frac{\boldsymbol{M}}{r}\right)\right]$$

$$= (\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{M})\,\triangle\left(\frac{1}{r}\right) - [(\boldsymbol{\mu}\cdot\nabla)(\boldsymbol{M}\cdot\nabla)]\left(\frac{1}{r}\right). \tag{193}$$

$r \neq 0$ のとき，微分法によって I_b は容易に計算され，

$$-\frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\mu})r^2}{r^5}$$

となる．単なる関数とみなせば，(193) は原点で $1/r^3$ の特異性をもつ．演算子 I_b の作用を決めるには，点 $r = 0$ を含む小さな領域で I_b と正則な関数 $f(\boldsymbol{r})$ の積を積分し，そ

の結果を調べるのがよい (*). そのために，I_b をつぎの形に表わす：

$$I_b=\frac{2}{3}(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{M})\triangle\left(\frac{1}{r}\right)-\left[(\boldsymbol{\mu}\cdot\nabla)(\boldsymbol{M}\cdot\nabla)-\frac{1}{3}(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{M})\triangle\right]\left(\frac{1}{r}\right). \tag{193'}$$

この式の第2項は，$\boldsymbol{r}$ の関数がつくる空間の2階微分演算子である．上に示した積分を行なうために，$f(\boldsymbol{r})$ を球面調和関数に展開すれば，角に関する積分に寄与するのは2位の球面調和関数の係数だけである．これは原点で少なくとも r^2 のように0に近づく．それゆえ (193′) の第2項は $1/r^3$ の特異性をもつにもかかわらず，原点における寄与が0となる．第1項については，付録 A の (12) を使って $-(8\pi/3)(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{M})\delta(\boldsymbol{r})$ の形に書き表わすことができる．結局，原点をも含めてどのような $\boldsymbol{r}$ に対しても，

$$I_b=-\frac{8\pi}{3}(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\mu})\delta(\boldsymbol{r})-\frac{1}{r^3}\left[3\left(\boldsymbol{M}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\left(\boldsymbol{\mu}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)-(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{\mu})\right] \tag{194}$$

が成り立つ．

(192) と (194) は非相対論的極限において成り立ち，これによって原子の準位の超微細構造が v^2/c^2 の大きさを除いて定められる．特に，超微細構造に対する s 電子の寄与は接触項 $-(8\pi/3)(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{M})\delta(\boldsymbol{r})$ によって与えられる (**).

(*) ［訳注］ 原著のこのあとの所論には不備な点があるのですこし説明を加えておく．(193) から (194) を導くには，つぎのようにすればよい：$\varphi(\boldsymbol{r})$ は有界なささえをもつ無限回微分可能な任意の関数とする (第1巻，293 頁)．初等的な計算により，

$$\int\frac{1}{r}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi\right)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=-\frac{4\pi\,\varphi(0)}{3}+\int\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{r}\right)\varphi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

超関数 T の導関数 (第1巻，296 頁) を $(\partial T/\partial x)_{\text{dist.}}$ などと書けば，上の式は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{r}\right)_{\text{dist.}}=-\frac{4\pi}{3}\delta(\boldsymbol{r})+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{r} \tag{a}$$

であることを示す．x を y または z に変えても同様である．いま，x, y 軸を xy 平面内で $\pi/4$ だけ回転し，新しい座標軸を x', y' 軸とすれば，

$$\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}-\frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right).$$

これから (a) を使って，

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}\frac{1}{r}\right)_{\text{dist.}}=\frac{\partial^2}{\partial x\,\partial y}\frac{1}{r} \tag{b}$$

が得られる．x, y を y, z または z, x に替えても同様である．(a) と (b) から (194) は簡単に出てくる．

(**) ［訳注］ (194) 式の右辺の第1項を“フェルミ相互作用”という．これは原点にある核と電子が接触したときにのみ作用する形になっているので，“接触相互作用”とも呼ばれる．この相互作用を行ないうる電子は，原点で波動関数が0にならない s 電子だけである．

§31. 高次の補正とホルディー=ボートホイゼン変換(*)

v/c に関する最も低い次数の項だけをとれば，ディラック理論はパウリの2成分理論に同値であるが，いつも方程式 (182)，(183) から出発して，高次の相対論的補正を求めることができる．そのためには，$1/M'$ を $[(W-e\varphi)/2m]$ のべき級数に展開し，

$$\frac{1}{M'}=\frac{1}{m}\left[1-\frac{W-e\varphi}{2m}+\left(\frac{W-e\varphi}{2m}\right)^2-\cdots\right]$$

を代入する．

$$\left\langle\frac{W-e\varphi}{2m}\right\rangle\simeq\left\langle\frac{\pi^2}{4m^2}\right\rangle\simeq O\left(\frac{v^2}{c^2}\right)$$

であるから，上の式は実質上 v^2/c^2 によるべき級数展開である．この展開を第1項で切れば，パウリの理論に戻る．これは §29 で述べたものである．第1項より先まで展開を進めると，高次の相対論的補正を得る．しかしながら，v^2/c^2 程度の補正を考えに入れると，(182)，(183) の形のディラック理論は形式上2成分の理論に同値ではなくなる．実際，

1° 規格化の場合にも，偶演算子の行列要素を計算する場合にも，小さい成分の寄与が無視できなくなる．

2° 方程式 (183) が本来の意味の固有値方程式ではなくなる (注 (19) を参照)．

このことによって上記の方法が完全に捨てられるものではないとしても，結果の適用と解釈にいっそう微妙な問題が生じる．ホルディーとボートホイゼン (21) は別の方法を提案した．これによれば，v/c に関する次数をあらかじめどのように与えても，ディラック理論を2成分の理論によって近似することができる．この方法の本質は適当なユニタリ変換を選び，これをディラック理論の波動関数と演算子に施すことにある．この新しい表示——これを FW 表示と呼ぼう——におけるディラックのハミルトニアンは，v/c に関してあらかじめ決めた次数までの近似で《偶》演算子となり，その結果波動方程式のなかで小さい成分と大きい成分は完全に分離される．それゆえ小さい成分を単純に無視することができ，その結果として求める2成分の理論が得られる．この場合，2成分の理論における演算子は FW 表示の《偶》演算子から単純に導かれるものであり，もとの表示の演算子からではない．こうしてわれわれは非相対論的力学の演算子に関する新しい解釈，特に位置の演算子について，多くの点でもとのものより満足すべき解釈に到達する．

この節の残りは FW 変換とディラック方程式の非相対論近似へのその応用に当てる．

§32. 自由粒子に対する FW 変換

1自由粒子の場合には，v/c のすべての次数に対して小さい成分と大きい成分を分離す

---

(21) L. L. FOLDY と S. A. WOUTHUSEN, *Phys. Rev.*, **78** (1958), 29.

(*) [訳注] わが国では谷純男氏が同じ理論を出したので (*Prog. Theor. Phys.*, **6** (1951), 267)，谷 FW 変換と呼ぶことが多い．

ることができる．

実際，ディラックのハミルトニアン

$$H_0 \equiv (\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}) + \beta m$$

を考え，正のエネルギーをもつ解の空間への射影子を Γ_+ とし，負のエネルギーをもつ解の空間への射影子を Γ_- とする．すなわち，

$$\Gamma_\pm \equiv \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{H_0}{E_p}\right] = \frac{1}{2}\left[1 \pm \frac{(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}) + \beta m}{E_p}\right], \qquad E_p \equiv \sqrt{m^2 + \boldsymbol{p}^2}. \tag{195}$$

他方，大きい成分の空間と小さい成分の空間への射影子をそれぞれ B_+，B_- によって表わす．すなわち，

$$B_\pm \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \beta).$$

FW 表示に移す演算子 U は，Γ_+ を B_+ に，Γ_- を B_- に変換する演算子であると定義する．FW 表示のベクトルと演算子にはダッシュ記号を付けることにすれば，

$$U^\dagger U = U U^\dagger = 1, \qquad \Gamma'_\pm \equiv U \Gamma_\pm U^\dagger = B_\pm.$$

U を完全に決めるために，これが並進，回転，反転によって不変であるという条件を付け加える．このとき U は位相を除いて定められることが示されるが，証明は読者に委ねよう．この位相を固定して，

$$U = \sqrt{\frac{2E_p}{m + E_p}}\,\frac{1}{2}\left[1 + \beta\frac{H_0}{E_p}\right] \tag{196}$$

$$= \sqrt{\frac{m + E_p}{2E_p}} + \beta\frac{(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})}{\sqrt{2E_p(m + E_p)}} \tag{196'}$$

が成り立つ．この式によって表わされる U が求める性質をすべてもつことは容易に確かめられる．

U は時間を含まないから，FW 表示において状態の変化を定めるハミルトニアン H_F は単に

$$H_F = U H_D U^\dagger$$

によって与えられ，さらに (196) を使えば，

$$H_F = \beta E_p \equiv \beta(m^2 + \boldsymbol{p}^2)^{1/2} \tag{197}$$

を得る．

H_F は偶演算子であるから，変化の方程式のなかで大きい成分 Φ' と小さい成分 χ' は完全に分離され，はじめに述べた結果と一致する．すなわち，

$$\mathrm{i}\partial\Phi'/\partial t = E_p\Phi' \tag{198a}$$

$$\mathrm{i}\partial\chi'/\partial t = -E_p\chi'. \tag{198b}$$

正のエネルギーをもつ解に限れば——非相対論的エネルギーに限ればもちろんのこと——

ディラックの理論は方程式 (198a) によって表わされる2成分の理論と同値であり，この同値性は v/c のすべての次数に対して厳密に成り立つ．

演算子 U は $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{J}$ および偶奇性演算子 P と交換するが，$\boldsymbol{r}$ とは交換しない．$\boldsymbol{r}$ を対角型にする表現において，U はつぎの要素から成る積分演算子である：

$$\langle \boldsymbol{r}|U|\boldsymbol{r}'\rangle = \iint \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{p} \langle \boldsymbol{p}|U|\boldsymbol{p}'\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{p}' \langle \boldsymbol{p}'|\boldsymbol{r}'\rangle.$$

さらに (196′) を使えば，

$$\langle \boldsymbol{r}|U|\boldsymbol{r}'\rangle = (2\pi)^{-3}\int\left[\sqrt{\frac{m+E_p}{2E_p}} + \beta\frac{(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})}{\sqrt{2E_p(m+E_p)}}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

を得る．$\langle \boldsymbol{r}|U|\boldsymbol{r}'\rangle$ は $(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ の関数であり，$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \gg 1/m$ のときは事実上0であるが，$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ が $1/m$ 程度以下になれば無視できない値をとる．それゆえ FW 変換は非局所的な変換である．これによって $\Psi(\boldsymbol{r})$ から変換されたスピノール $\Psi'(\boldsymbol{r})$ は，$\boldsymbol{r}$ を囲む一つの領域で Ψ がとる値に関して，ある種の平均をとったものである．この領域の1次元の大きさは $1/m$ 程度，すなわちこの粒子のコンプトン波長の程度である．

FW 表示において粒子の位置を表わす演算子は

$$\boldsymbol{r}' \equiv U\boldsymbol{r}U$$

である．これは $\boldsymbol{r}$ と異なる．ホルディーとボートホイゼンにしたがい，FW 表示における $\boldsymbol{r}$ によって表わされる量を**平均位置**と名づけよう．普通の表示においてこれを表わす演算子を $\boldsymbol{R}$ とすれば，$\boldsymbol{R}' \equiv \boldsymbol{r}$ であるから，

$$\boldsymbol{R} \equiv U^{\dagger}\boldsymbol{r}U.$$

ディラック表現において $\boldsymbol{R}$ は非局所的な演算子であり，スピノール $\Psi(\boldsymbol{r})$ に対するその作用はおおよそのところ，各点を囲む $1/m$ 程度の領域でスピノールがとる値に対する一種の平均を求めてこの点におけるスピノールの値に代え，$\boldsymbol{r}$ を掛けることに相当する．さきに述べた平均位置の名はこれによる．

FW 表示における《偶》オブザーバブルを Q' とするとき，上のように定義した2成分の理論においてこれに対応するオブザーバブル Q_{NR} を導くには，大きい成分の空間に属するベクトルのあいだにある行列要素だけを取り出せばよい．すなわち，$Q_{\mathrm{NR}} \equiv B_+ Q' B_+$. 特に，2成分の理論において位置を表わすオブザーバブル $\boldsymbol{r}$ は《平均位置》$\boldsymbol{R}$ に対応し，ディラック理論における本来の位置演算子には対応しない [22].

---

[22] ここに述べた解釈によれば，2成分の理論における軌道角運動量 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ とスピン $\boldsymbol{\sigma}$ はディラック理論における軌道角運動量とスピンに対応するのではなく，《平均軌道角運動量》$\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{p}$ と《平均スピン》$\boldsymbol{\Sigma}$ に対応する．ここで $\boldsymbol{\Sigma}$ は FW 表示の $\boldsymbol{\sigma}$ が対応する演算子，すなわち $\boldsymbol{\Sigma}' \equiv \boldsymbol{\sigma}$ となる演算子である．読者は平均スピンと平均軌道角運動量の各成分が自由粒子のハミルトニアンと交換することを確か↗

§ 33.　場のなかの1粒子に対する FW 変換

場があるとき，ディラックのハミルトニアンはつぎの形に書き表わされる：

$$H=\beta m+\mathcal{I}+\mathcal{P},\qquad \mathcal{I}\equiv(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi})=(\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A})),\qquad \mathcal{P}\equiv e\varphi.$$

このハミルトニアンを厳密に《偶》とする表示は一般に存在しない．それにもかかわらず，適当なユニタリ変換をつぎつぎに施して新しい表示に移り，ハミルトニアンの《奇》部の v/c に対する位数をだんだん上げてゆくことができる．

実際，ユニタリ変換

$$U=\exp(\beta\mathcal{I}/2m)$$

を施してみよう．新しい表示において状態の変化を定めるハミルトニアン H_1 は

$$H_1=UHU^\dagger-\mathrm{i}U\frac{\partial U^\dagger}{\partial t}$$

によって与えられる．

$\beta\mathcal{I}$ が $(\beta m+\mathcal{I})$ と反交換し，$U^\dagger=\exp(-\beta\mathcal{I}/2m)$ であることを使えば，

$$\begin{aligned}U(\beta m+\mathcal{I})U^\dagger&=U^2(\beta m+\mathcal{I})\\&=\beta m\left[\cos\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)+\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)\sin\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)\right]+m\left[\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)\cos\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)-\sin\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)\right]\end{aligned}$$

を得る．$U\mathcal{P}U^\dagger$ と $-\mathrm{i}U\partial U^\dagger/\partial t$ の項についても，これらを $\mathcal{I}/m$ のべきによる級数展開の形に書くことができる．そのためには，任意の演算子 A, B に対して成り立つ演算子間の恒等式（第8章，問題4）

$$\mathrm{e}^{A}B\mathrm{e}^{-A}=B+[A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]]+\cdots+\frac{1}{n!}\overbrace{[A,[A,\cdots[A,[A,B]]\cdots]]}^{n\text{ 個の括弧}}+\cdots$$

を利用すればよい．

$\mathcal{I}$ が時間を含まないときの H' に対する計算結果だけを与える．ここで問題になっているのは第1近似であるから $H'=H_1$ と置けば，

$$\begin{aligned}H_1&=\beta m+\mathcal{P}_1+\mathcal{I}_1\\ \mathcal{P}_1&=\mathcal{P}+\beta\frac{\mathcal{I}^2}{2m}-\frac{1}{8}m\left[\frac{\mathcal{I}}{m},\left[\frac{\mathcal{I}}{m},\frac{\mathcal{P}}{m}\right]\right]-\frac{1}{8}\beta m\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)^4+\cdots\\ \mathcal{I}_1&=m\left(\frac{1}{2}\beta\left[\frac{\mathcal{I}}{m},\frac{\mathcal{P}}{m}\right]-\frac{1}{3}\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)^3\right)+\cdots\end{aligned}$$

を得る．H_1 の《偶》部分と《奇》部分が級数の形で与えられている．具体的に示した項

↘ められたい．本来のスピンと軌道角運動量はこの性質をもたない．また

$$\boldsymbol{J}\equiv(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}=(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{p})+\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$$

に注意しておく．

によって，$\mathcal{P}_1$ の式は $(\mathcal{I}/m)^6$ または $(\mathcal{P}/m)(\mathcal{I}/m)^4$ を除外して定められ，$\mathcal{I}_1$ の式は $(\mathcal{I}/m)^5$ あるいは $(\mathcal{P}/m)(\mathcal{I}/m)^3$ を除いて定まる．それゆえ H_1 の《奇》部分は H のそれよりも小さく，少なくとも $\mathcal{P}/m$ または $(\mathcal{I}/m)^2$ 程度の因数が掛かっている．非相対論的極限において，$\mathcal{P}/m$ および $\mathcal{I}/m$ はそれぞれ $(v/c)^2$ および v/c 程度の大きさである．それゆえ $\mathcal{I}_1$ は $(v/c)^3$ の程度である．

H に対して施した操作を H_1 に対して繰り返す．言いかえると，演算子

$$U_1 = \exp(\beta\mathcal{I}_1/2m)$$

による新しいユニタリ変換を行ない，新しいハミルトニアンを H_2 で表わす．その《奇》部分 $\mathcal{I}_2$ は H_1 のそれよりも小さく，少なくとも $\mathcal{P}_1/m$ または $(\mathcal{I}_1/m)^2$ 程度の因数が掛けられる．非相対論的極限において $\mathcal{P}_1/m$ は $(v/c)^2$，$(\mathcal{I}_1/m)^2$ は $(v/c)^6$ 程度の大きさである．それゆえ $\mathcal{I}_2$ は $(v/c)^5$ の程度である．この程度の項を無視すれば，H_2 はつぎの式によって与えられる《偶》演算子である：

$$\begin{aligned}H_2 &\simeq \beta m + \mathcal{P}_1 + O(v^5)\\ &\simeq \beta m + \mathcal{P} + \beta\frac{\mathcal{I}^2}{2m} - \frac{1}{8}m\left[\frac{\mathcal{I}}{m},\left[\frac{\mathcal{I}}{m},\frac{\mathcal{P}}{m}\right]\right] - \frac{1}{8}\beta m\left(\frac{\mathcal{I}}{m}\right)^4 + O(v^5)\\ &\simeq \beta m + e\varphi + \frac{1}{2m}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 - \frac{e}{8m^2}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),\varphi]] - \frac{1}{8m^3}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^4 + O(v^5).\end{aligned}$$

同様に，$(v/c)^3$ 程度の項を無視すれば，H_1 はつぎの式によって与えられる《偶》演算子である：

$$H_1 \simeq \beta m + e\varphi + \frac{1}{2m}\beta(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 + O(v^3).$$

ここまでくれば，自由粒子の場合と同じようにして2成分の理論に移る．$(v/c)^5$ を除けば，正のエネルギーをもつ解は大きい成分の空間に属する波動関数 Φ' によって表わされ，Φ' は方程式

$$\mathrm{i}\frac{\partial\Phi'}{\partial t} = (m + H'_{\mathrm{NR}})\Phi'$$

にしたがう．ここで $(m + H'_{\mathrm{NR}})$ は，上に示した H_2 の近似式を大きい成分の空間に落とした射影である．言いかえれば，

$$H'_{\mathrm{NR}} = e\varphi + \frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^2 - \frac{e}{8m^2}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),\varphi]] - \frac{1}{8m^3}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^4. \quad (199)$$

初めの2項はパウリ理論のハミルトニアン H_{NR} をつくる．終りの2項は非相対論的エネルギー H_{NR} に対する $(v/c)^2$ 程度の相対論的補正になっている．

簡単な計算によって，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi})^4 = (\boldsymbol{\pi}^2 - e(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}))^2 \quad (200)$$

$$[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\pi}),\varphi]] = \mathrm{div}\,\boldsymbol{\mathcal{E}} + 2(\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\mathcal{E}}\times\boldsymbol{\pi})) \tag{201}$$

が得られ，これを使えば H'_{NR} をもっとなじみ深い形に書くことができる．

上に述べたようなユニタリ変換をつぎつぎに施し，その回数を十分多くすれば，正のエネルギーをもつ状態を v/c に関していくらでも高い次数まで与えるような2成分の理論をつくることができる．新しい変換を施すごとに誤差は因数 $(v/c)^2$ が掛けられるだけ小さくなる．展開の収束に関する研究は微妙である．大多数の場合には漸近展開であるという可能性がきわめて大きい．大体のところ，これは演算子 $\boldsymbol{p}/m$，すなわち $(\hbar/mc)\,\mathrm{grad}$ ［および $\partial/m\partial t$ すなわち $(\hbar/mc^2)\partial/\partial t$］のべきによる級数展開である．それゆえ，この級数の項が減少する度合は，$\hbar/mc$ 程度の長さ［および $\hbar/mc^2$ 程度の時間，すなわちコンプトン波長を光速で走るために必要な時間］に対するポテンシャル $(\boldsymbol{A},\varphi)$ の変動が小さいほど速い．

§34. 中心力静電ポテンシャルのなかの電子

前の §33 の技巧が適用される例として，中心力静電ポテンシャル $V(r)\equiv e\varphi(r)$ のなかにある電子を考える．この場合は $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=0$ であり，パウリ理論のハミルトニアンは普通のシュレーディンガー理論のハミルトニアンである．すなわち，

$$H_{\mathrm{NR}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r).$$

v^2/c^2 についてもう一つ高い次数まで計算を進めようとすれば，H_{NR} を H'_{NR} に置き換えなければならない．このことは (199) の終りの 2 項を H_{NR} に付け加えることに帰着する．いまの場合は

$$e\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\,\mathrm{grad}\,V = -\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}, \qquad e\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\,\triangle V$$

であるから，(200) と (201) を考慮すれば，

$$H'_{\mathrm{NR}} = H_{\mathrm{NR}} - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\triangle V. \tag{202}$$

補正の第1項 $-\boldsymbol{p}^4/8m^3c^2$ は運動エネルギー $\boldsymbol{p}^2/2m$ に対する相対論的補正である．第2項はスピン－軌道相互作用の項である（第13章 (91) を参照）．第3項 $\hbar^2\triangle V/8m^2c^2$ は中心力ポテンシャルに対する補正項であって，ダーウィン項の名で知られている．$V(r) = -Ze^2/r$（純クーロン・ポテンシャル）の場合，ダーウィン項は $(\pi Ze^2\hbar^2/2m^2c^2)\delta(\boldsymbol{r})$ に等しく，s 状態だけに作用する．

§35. 議論とまとめ

場があるときにも，場がないときと同様，2成分の非相対論的理論の演算子は，FW 表

示の演算子を大きい成分の空間へ射影したものである．特に，非相対論的理論の演算子 $\boldsymbol{r}$ は，さきに《平均位置》$\boldsymbol{R}$ と名づけたものと一致する．ディラックの理論では，粒子と電磁ポテンシャルとの相互作用は局所的な相互作用である．言いかえれば，粒子はそれが存在する点 $\boldsymbol{r}$ における電磁ポテンシャルと相互に作用する．FW 表示に移れば，$\boldsymbol{r}$ は《平均位置》を表わし，この相互作用は非局所的相互作用に変換され，粒子のまわりに $\hbar/mc$ ぐらいの大きさをもつ領域において電磁ポテンシャルがとる値もこの作用に寄与する．ポテンシャル $(\boldsymbol{A},\varphi)$ がこの領域ですこししか変わらない限り，この相互作用はテイラー展開によって表わされ，点 $\boldsymbol{r}$ におけるポテンシャルおよびその各階の導関数の値が入ってくる．H'_{NR} のようなハミルトニアン（式 (199) または (202)）はこの展開の初めの数項をとったものである．

その結果，非相対論的極限において，ディラック電子は点電荷としてではなく，1 次元の大きさが $\hbar/mc$ の領域にひろがった電荷と電流の分布として現われる．これによって，磁気モーメントの存在を特徴づける相互作用の項（相互作用 $-(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}})$，スピン－軌道相互作用）やひろがった電荷分布の項（ダーウィン項）の出現が説明される．

終りに $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{r}/r^3$ あるいは $\varphi=-Ze/r$ のような原点で特異点をもつポテンシャルに対する非相対論近似の適用は，厳密に言えば正しくはないということに注意する．点 $r=0$ の近くで $e\boldsymbol{A}/m$, $e\varphi/m$ が小さくないからである．実際，この節で述べた逐次近似法を十分さきまで進めるならば，非相対論的ハミルトニアンのなかに，エネルギーに対して無限大の寄与を与えるほど高位の特異点を原点でもつ項が現われる．この困難の解決法は上の議論のなかに暗示されている．非相対論的ハミルトニアンのなかで $\boldsymbol{A}$ と φ は，1 次元の大きさが $\hbar/mc$ 程度の領域でこれらの量がとる値のある平均によって置き換えられる．非相対論近似が厳密に正当化されるとすれば，このことは計算の過程に現われるすべての特異な式に対し，原点から距離 $\hbar/mc$ のところで特異性の《切り捨て》を行なうことに帰着する．結論として，上にあげた二つの場合に非相対論近似を適用しうるためには，点 $r=\hbar/mc$ においてそれぞれ

$$e|\boldsymbol{A}|\ll mc^2, \qquad e\varphi\ll mc^2$$

が成り立てば十分である [23]．

---

[23] 原子核の質量を m_{N} と書けば $|\boldsymbol{M}|\simeq Ze\hbar/m_{\mathrm{N}}c$ である．点 $r=\hbar/mc$ における $e\boldsymbol{A}/mc^2$ の大きさは $(e^2/\hbar c)(Zm/m_{\mathrm{N}})$ 程度，すなわち $10^{-5}\sim10^{-6}$ である．それゆえわれわれの超微細相互作用に関する計算は完全に正当化される．第二の例について言えば，$e\varphi/mc^2$ は $Ze^2/\hbar c$ 程度であるから，計算が妥当であるための条件は $Z\ll137$ である．

VI. 負のエネルギーと陽電子の理論

Θαλασσα! θαλασσα!（海だ！　海だ！）
《アナバシス》IV. 8 (*)

§ 36.　荷電共役解の性質

§19 で定義した荷電共役の概念は以下の議論に役立つ．荷電共役変換によって，同じ電磁ポテンシャルのなかにある二つの異なる粒子の変化を表わす波動関数のあいだに（反線形で可逆な (**)）一つの対応がつけられる．対応する粒子の質量は同じ m であるが，電荷は反対の符号をもち，一方は $+e$，他方は $-e$ である．

第一の粒子に結びついた一つの物理量が $Q(e)$ で表わされるとき，第二の粒子に結びついた同じ量は $Q(-e)$ で表わされる．たとえば，運動量はどちらにおいても $\boldsymbol{p}\equiv -\mathrm{i}\nabla$ で表わされるが，エネルギーは一つが $H(e)\equiv(\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}))+\beta m+e\varphi$，もう一つが $H(-e)\equiv(\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A}))+\beta m-e\varphi$ によって表わされる．

一つの解 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ と荷電共役な解 $\Psi^C(\boldsymbol{r},t)$ を考える．これらの解によって表わされる状態の物理的性質をくらべよう．(124) によって定義された反線形演算子 K_C を使えば，

$$\Psi^C = K_C\Psi \tag{203}$$

であることはすでに知っている．状態 Ψ における演算子 Q の平均値を記号 $\langle Q\rangle$ で表わし，状態 Ψ^C における Q の平均値を記号 $\langle Q\rangle_C$ で表わす．状態 Ψ と Ψ^C が 1 に規格化してあるとすれば，

$$\langle Q\rangle = \langle\Psi|Q|\Psi\rangle, \qquad \langle Q\rangle_C = \langle\Psi^C|Q|\Psi^C\rangle$$

である．(203) から，

$$\langle Q\rangle_C = (\langle\Psi|K_C^\dagger)(QK_C|\Psi\rangle) = \langle\Psi|(K_C^\dagger QK_C)|\Psi\rangle^* = \langle\Psi|(K_C^\dagger Q^\dagger K_C)|\Psi\rangle.$$

これから平均値のあいだの関係

$$\langle Q\rangle_C = \langle(K_C^\dagger Q^\dagger K_C)\rangle \tag{204}$$

が導かれる．

この関係を適用して，反ユニタリ変換 K_C の性質を使えば，状態 Ψ と荷電共役状態における平均値のあいだにつぎの関係を得る：

(*)［訳注］《アナバシス》(Anabasis) はクセノフォン (430～355 BC；ギリシアの歴史家，哲学者）が 379～371 BC に書いた遠征記．

(**)［訳注］対応 T が逆対応 T^{-1} に等しいとき，著者は《可逆 (réciproque)》と呼んでいる．

$$\langle\beta\rangle_C = -\langle\beta\rangle, \quad \langle\boldsymbol{\alpha}\rangle_C = \langle\boldsymbol{\alpha}\rangle, \quad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle, \quad \langle\boldsymbol{r}\rangle_C = \langle\boldsymbol{r}\rangle,$$
$$\langle\boldsymbol{p}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{p}\rangle, \quad \langle\boldsymbol{L}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{L}\rangle, \quad \langle P(\boldsymbol{r}_0)\rangle_C = \langle P(\boldsymbol{r}_0)\rangle, \tag{205}$$
$$\langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\rangle_C = \langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}_0)\rangle, \quad \langle\boldsymbol{J}\rangle_C = -\langle\boldsymbol{J}\rangle, \quad \langle H(-e)\rangle_C = -\langle H(e)\rangle.$$

荷電共役な二つの解はすべての点において同じ確率密度と同じ流れの密度をもつ——それゆえすべての点において荷電密度と電流密度は反対符号をもつ——けれども，エネルギーの符号は反対であることに注意する．荷電共役変換によってエネルギーの符号が変わるのである．

§37. 負のエネルギーをもつ解の異常な挙動

これだけ準備すれば，負のエネルギーの問題を詳しく調べることができる．

まず自由粒子の場合を考えよう．ディラック方程式の解は §23 で与えられている．エネルギー・スペクトルは二つの連続帯 $(-\infty, -mc^2)$，$(mc^2, +\infty)$ から成り，これらは幅 $2mc^2$ の区間によって分離される (20·2 図(a))．第一の帯は負のエネルギー $E=-E_p=-\sqrt{m^2+p^2}$ をもつ状態に対応し，第二の帯は正のエネルギーをもつ状態に対応する．

自由波束の運動を調べてみる．一般に波束の中心は平均的な意味においてだけ古典軌道を描くことを示そう．そのために，ハイゼンベルク表示の運動方程式

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t = \mathrm{i}[H, \boldsymbol{r}] = \boldsymbol{\alpha} \tag{206}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}/\mathrm{d}t = \mathrm{i}[H, \boldsymbol{\alpha}] = \mathrm{i}(H\boldsymbol{\alpha}+\boldsymbol{\alpha}H) - 2\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}H = 2\mathrm{i}\boldsymbol{p} - 2\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}H \tag{207}$$

を積分する．$\boldsymbol{p}$ と H は時刻とともに変わらないから，方程式 (207) は容易に積分され，

$$\boldsymbol{\alpha}(t) = \left(\boldsymbol{\alpha}(0) - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht} + \frac{\boldsymbol{p}}{H}$$

となる．これによって $\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t$ が t の関数として具体的に与えられるから，方程式 (206) も容易に積分され，

$$\boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{r}(0) + \frac{\boldsymbol{p}}{H}t + \mathrm{i}\left(\boldsymbol{\alpha}(0) + \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}}{2H} \tag{208}$$

となる．(208) によって時刻 t におけるハイゼンベルク表示の演算子 $\boldsymbol{r}$ が与えられ，これは初めの時刻 $t=0$ において演算子 $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{\alpha}$ がとる値によって決まる．(208) から任意の波束の中心 $\langle\boldsymbol{r}\rangle$ の運動法則を導き，これを古典法則

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{cl.}}(t) = \boldsymbol{r}_{\mathrm{cl.}}(0) + \left(\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)_{\mathrm{cl.}} t$$

と比較すれば，得るところが多い．自由波束は古典的な一様直線運動ではなく，もっと複雑な運動をする．この運動は速度 $\langle\boldsymbol{p}/H\rangle$ の一様な直線運動と速い振動

$$\left\langle \mathrm{i}\left(\boldsymbol{\alpha}(0) - \frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}}{2H}\right\rangle$$

の合成によって生じる．この振動の振幅および周期はそれぞれ $\hbar/2mc$ および $\hbar/2mc^2$ 程度の大きさである．この振動は《Zitterbewegung（チッターベベーグング，顫動)》の名で知られている．

波束が正のエネルギーをもつ波だけ，または負のエネルギーをもつ波だけの重ね合わせであるとき，《Zitterbewegung》の項は0になる．これを見るためには，

$$\Gamma_{\pm}\left(\boldsymbol{\alpha}-\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right)\frac{\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}Ht}}{2H}\Gamma_{\pm}=0$$

を示せばよい．Γ_+ と Γ_- はそれぞれ正のエネルギーをもつ状態および負のエネルギーをもつ状態への射影子である（定義（195)）．まず

$$[H,\boldsymbol{\alpha}]=2\boldsymbol{p}-2\boldsymbol{\alpha}H, \qquad [\Gamma_{\pm},\boldsymbol{\alpha}]=\pm\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\mp\boldsymbol{\alpha}\frac{H}{E_p}$$

が得られる．$H\Gamma_{\pm}=\pm E_p\Gamma_{\pm}$ を使って，上の式から，

$$0\equiv\Gamma_{\pm}[\Gamma_{\pm},\boldsymbol{\alpha}]\Gamma_{\pm}=\Gamma_{\pm}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{H}-\boldsymbol{\alpha}\right)\Gamma_{\pm}$$

を導き出す．さらに H が Γ_+ および Γ_- と交換するという事実を利用すれば，さきに述べた性質はこの式から導かれる．それゆえ《Zitterbewegung》は波束のなかで正のエネルギーをもつ成分と負のエネルギーをもつ成分のあいだに生じる干渉効果である．

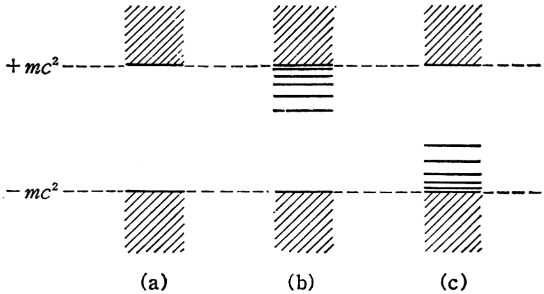
《Zitterbewegung》の効果は負のエネルギーに結びついた奇妙な効果であるが，それ自体で困難を構成するものではない．困難は負のエネルギーをもつ状態だけからつくられた波束の運動を調べるときに現われる．この場合《Zitterbewegung》は消える．波束の中心は速度

$$v=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}}{H}\right\rangle=-\left\langle\frac{\boldsymbol{p}}{E_p}\right\rangle$$

の一様な直線運動を行ない，その方向は運動量 $\langle\boldsymbol{p}\rangle$ と反対である．特に非相対論的極限 $(H\simeq-mc^2)$ において，関係 $\boldsymbol{v}=-\langle\boldsymbol{p}\rangle/m$ を得る．すなわち，粒子が負の質量 $-m$ をもつかのようにすべてのことが起こる．

静止した場のなかの波束の運動を調べるとき，この型の困難はいっそう明確に現われる．

具体的に述べるため，クーロン引力ポテンシャル $-Ze^2/r$ のなかの電子を考える．このスペクトルは（20•2図(b) を参照）mc^2 から $+\infty$ に至る正のエネルギーの連続帯と，mc^2 より小さい正のエネルギー準位から成るとびとびの列と，$-mc^2$ から $-\infty$ に至る負のエネルギーの連続帯から成る．負のエネルギーをもつ状態を脳裏に描くために，荷電共役変換をこの状態に施せば，同じポテンシャルのなかで同じ質量と反対符号の電荷をも



20·2図 ディラック電子のエネルギー・スペクトル. (a) 自由電子; (b) 引力ポテンシャル $-Ze^2/r$ のなかにあるとき; (c) 斥力ポテンシャル Ze^2/r のなかにあるとき.

つ1粒子(すなわち陽電子)の状態, あるいは同じことであるが, 斥力ポテンシャル Ze^2/r のなかの1電子の状態に移ることを思い出す. この変換により, エネルギーは符号を変え, 小さい成分と大きい成分は入れ替わるが, 密度と流れの密度はもとのままである (式(205) を参照). 斥力ポテンシャル Ze^2/r のなかにある電子のスペクトルは20·2図(c) に示される. 斥力ポテンシャルにおける正のエネルギーの連続部分には, 引力ポテンシャルにおける負のエネルギーの連続部分が対応する.

特に負のエネルギーをもち, 非相対論近似の適用範囲 ($Ze^2 \ll 1$, エネルギーは $-mc^2$ に近い) にある波束の運動を考える. 荷電共役変換によってこの波束に対応する波束は正のエネルギーをもち, その運動は同じである. 特に速度がきわめて小さい極限においては, 古典近似を適用することができ (第6章, §5を参照), 波束の中心はちょうど反対符号のポテンシャルのなかにある古典電子のように, 言いかえればポテンシャル $-Ze^2/r$ のなかにあって負の質量 $-m$ をもつ粒子のように動くはずである. すなわち, 速度は運動量と逆の向きを, 加速度は力と逆の向きを指す. このような状態は一度も実験的に観測されたことがない.

§38. 負のエネルギーをもつ状態の再解釈.《空孔》と陽電子の理論

このままでは, 負のエネルギーをもつ解は物理的意味をまったくもたない. 正のエネルギーをもつ状態と負のエネルギーをもつ状態を完全に切り離すことが可能ならば, 後者を単純に無視することもできよう. しかしそうはゆかないのである.

たとえば, 正のエネルギー E_+ の状態にある自由電子を考え, 時刻0から時刻 t までのあいだ, これを振動数 ω の電波の場のなかに置く. t が十分長く, 場の強さがあまり強すぎないときには, 得られる結果は第17章, §6の方法によって計算され, この電子が

エネルギー $E_+ + \hbar\omega$ または $E_+ - \hbar\omega$ の状態へ遷移を起こす確率は0でないことがわかる．特に

$$\hbar\omega > (E_+ + mc^2)$$

ならば，第2の遷移は負のエネルギーをもつ状態に向かって行なわれる．

もう一つの例として，水素原子の完全スペクトルを考える(20•2図(b))．電子と電磁場との相互作用によって，原子が与えられた状態から低いエネルギーの状態に向かって放射遷移を行なう可能性がいつでも存在する．したがって，水素原子の束縛状態の一つにある電子は，それが孤立しているときでも，一つまたはいくつかの光子を放射するとともに負のエネルギーをもつ状態に向かって量子的な飛躍を行なうことがありうる．そのうえ，スペクトルには下限がないから，水素原子は安定な状態をもたない(24)．

この困難を避けるために，ディラックはつぎのような考え方を示した．われわれが《真空》と呼ぶもののなかでは，負のエネルギーをもつすべての状態が電子によって占められている．この《真空》に一つの電子を付け加えると，この電子は必ず正のエネルギーをもつ状態に見いだされる．なぜなら負のエネルギーをもつ状態はすっかり塞がっており，電子はフェルミ＝ディラック統計にしたがうからである．

それゆえ《真空》は密度が無限大で完全に縮退したフェルミ気体として現われる．それはまた，完全に観測不可能であり，重力的効果または電磁的効果を何一つひき起こさないと考える．与えられた状態の観測可能な物理的性質は，この状態の《真空》からのずれである．たとえば系(電子＋《真空》)の観測可能な電荷は，この系の全電荷と《真空》の電荷との差，すなわち電子の電荷である．またこの系の観測可能なエネルギーはその全エネルギーと《真空》のエネルギーとの差，したがって電子のエネルギーである．それゆえ現在までのところ，《真空》に対するこの新しい定義と測定可能な量に対するこの再解釈によってもたらされる効果は，電子が負のエネルギーの状態になることを排他原理の働きによって禁じることだけである(25)．

いま，負のエネルギーをもつ電子の《海》から一つの電子が失われたとき，何が観測されるかを調べてみる．観測可能な物理的性質に関して上に述べた規約をこの場合に適用すれば，この《空孔》は失われた電子の電荷と反対の電荷をもつという結論になる．同様に，《空孔》は反対符号すなわち正のエネルギーと，反対符号の運動量をもつ．この考察は失われた電子がハミルトニアンの固有状態にあってもなくても成り立つ．特に，失われ

(24) O. クラインが定式化した有名なパラドックスによれば，負のエネルギーをもつ状態への遷移が行なわれる可能性に対して，違った形の説明が与えられる．クラインのパラドックスについては多くの本に解説がある，たとえば，M. Born，前掲書(第1章の注(2)(第1巻，4頁))参照．

(25) 特に，《Zitterbewegung》の効果は自動的に打ち消される．

た電子が速度 v で移動する波束をつくっているとき，《空孔》も同じ速度で移動するが，運動量は符号が逆である．したがって《空孔》は正の質量 $+m$ と電荷 $-e$ をもつ1粒子のように振舞う．このような粒子は観測された．すなわち**陽電子**である．

電磁場または他のどんな擾乱でも適当なものが作用すれば，負のエネルギーをもつ電子の《海》に属する1電子が正のエネルギーをもつ状態に遷移を行なうことができる．負のエネルギーの《空孔》は陽電子として現われる．それゆえ，このような遷移においては，反対符号をもつ2粒子の組がつくられる．陽電子－電子対の生成は実験によって観測されている．

同じように，負のエネルギーをもつ電子の《海》のなかに《空孔》が生じたときには，電子が光子を放出して正のエネルギーの状態から，この空いている負のエネルギーの状態への遷移を行なうことができる．このような光子の放出を伴う電子－陽電子対の消滅現象もまた実験によって観測されている．

§39. 《空孔》理論の困難

いま簡単に説明した《空孔》理論によって，ディラック理論をいくつかの実験的事実——負のエネルギーをもつ状態が存在しないこと，陽電子の存在，対の生成と消滅——に結びつけることができる．それゆえ，これはきわめて大きい前進である．それにもかかわらず，この理論の限界と困難も強調しておいたほうがよい．

明らかに，ここで取り扱っているのは不完全な理論である．負のエネルギーをもつ状態がほぼ全部占められているという要請を設けたために，ただ一つの電子だけを記述したいときでさえ，この理論は1粒子の理論ではなくなっている．それゆえ，この章で説明したような1粒子に関するディラック理論の形式はこのような状況を記述するには不十分であり，つじつまの合う記述がなされることを期待できるのは，場の理論の枠のなかだけである．

《空孔》理論は量子化された電子場の理論に関する最初の下書きにすぎない．その功績は単純なイメージを提供した点にある．このことにより，《空孔》理論は正確な理論をつくるときの道案内として利用される．しかしこの考え方を精密化しようとするとすぐに欠陥や矛盾が現われる．

たとえば，この《真空》が無限に多くの電子から構成されているのに，電子間の相互作用がないという奇妙な性質に気がつく．

この理論のもう一つの欠陥は，電子と陽電子の演じる役割がきわめて非対称的に見えるという点である．また，この理論に荷電共役な理論を対応させ，陽電子に粒子の役割を，電子に空孔の役割を与え，物理的結果はすこしも変わらないようにすることもできる．荷

電共役変換に関して不変な方程式から出発すれば，これらの困難は場の理論の形式のなかですべて解決される．

最後に，負のエネルギーをもつ状態の定義そのものが，適用される電磁ポテンシャルによって変わることに注意しよう．§37の二つの場合，すなわち自由粒子の場合とクーロン場のなかにある粒子の場合では，負のエネルギーをもつ状態の空間が同じではない．たとえば，水素原子の基底状態の波動関数を平面波の級数に展開すれば，負のエネルギーをもつ平面波の寄与が小さいけれども0ではないことに気がつくであろう．上に述べた《真空》の定義において，考えられている負のエネルギーの状態は自由粒子のそれである．実際，場のないときに真空を定義するのが自然である．外部の電磁場を導入すると，この《真空》の状態が変えられ（対の生成），《真空》は分極性媒質のように振舞う．そのために《真空》内の電荷は実際よりすこししか現われない．これらの効果は場の理論においても見いだされる．空孔理論によってこれらを予想することはできるが，これらを計算するための一貫した手段は与えられていない．

演習と問題

1.　Ψ は場 A^μ があるときのクライン＝ゴルドン方程式の解であるとする．つぎの4元流れが連続の方程式を満たすことを示せ（第4章，問題1を参照）：

$$j^\mu = \frac{i}{2m}[\Psi^*(D^\mu\Psi) - \Psi(D^\mu\Psi)^*] \equiv \frac{i}{2m}[\Psi^*(\partial^\mu\Psi) - \Psi(\partial^\mu\Psi^*)] - \frac{e}{m}A^\mu\Psi^*\Psi.$$

2.　水素原子において，そのなかの電子の代りに，同じ質量と同じ電荷をもちクライン＝ゴルドン方程式にしたがう粒子を考える．このとき，とびとびのスペクトル準位 E は固有値方程式

$$\left[\triangle + m^2 - \left(E - \frac{e^2}{r}\right)^2\right]\Psi(r) = 0$$

によって与えられる．角変数と動径変数の分離によりこの方程式は厳密に解かれることを示せ．またとびとびのスペクトル準位は二つの量子数 n, l に依存する式

$$E^{nl} = m\left(1 + \frac{e^4}{(n-\varepsilon_l)^2}\right)^{-1/2}, \qquad \varepsilon_l = l + \frac{1}{2} - \left[\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - e^4\right]^{1/2}$$
$$[n = 1, 2, \cdots, \infty\,;\ l = 0, 1, \cdots, n-1]$$

によって与えられることを示せ．このスペクトルをシュレーディンガーの非相対論的理論によるスペクトルと比較せよ．

3.　20·1表（§10）によって定義された（必ずしもユニタリでない）行列 γ^A はすべて1に等しい行列式をもつ．このことを証明せよ．

4.　B を§10の終りで定義した行列とするとき，$BB^* = B^*B = -I$ を示せ．［まずつぎのことを証明せよ：

i) BB^* は単位行列のスカラー倍，したがって $BB^* = B^*B = \pm I$.

ii) B を定義するときに使った4個のユニタリ行列 γ^μ の系をどのように選んでも，行列 BB^* は同じものである].

5. §19で定義した荷電共役変換を表わす（反ユニタリ）演算子 K_C につき，つぎの性質を証明せよ：

$$K_C p_\mu K_C^\dagger = -p_\mu, \qquad K_C J_{\alpha\beta} K_C^\dagger = -J_{\alpha\beta},$$
$$K_C P K_C^\dagger = -P, \qquad K_C K_T K_C^\dagger = -K_T.$$

このことから，§17の変換を表わす演算子に対して採用した位相の選び方では，並進および固有ローレンツ変換を表わす演算子と K_C は交換し，空間の反転および時間反転と K_C は反交換することを導け．K_C がこれらすべての変換と交換するためには，位相の選び方をどのように修正すればよいか．

6. ディラックのハミルトニアンの式から，ハイゼンベルク表示における演算子 $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{\pi}$ の時間的変化の方程式 (147) と (148) を導け．またこれから方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\pi}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right] = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}, \qquad \frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t} = (\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{F}) \equiv e(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}})$$

を導け．ただし $\boldsymbol{F}$ は《ローレンツ力》: $\boldsymbol{F} \equiv e(\boldsymbol{\mathcal{E}} + \boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{\mathcal{H}})$．これらの方程式を古典力学の方程式 (22) および (21′) と比較せよ．

7. 場のないとき，ディラック方程式の解はすべてクライン＝ゴルドン方程式の解である．この逆は成り立たないことを示すために反例をあげよ．

8. 等式 (169) を証明せよ．

9. z 軸方向を向いた運動量 $\boldsymbol{p}$ のディラック平面波を自由球面波の級数に展開せよ．

10. 水素原子の波動関数のうち，動径関数 F と G が互いに他のスカラー倍になるものを系統的に求めよ．その準位は $n' = 0$（したがって $J = n - (1/2)$），$l = n - 1$ に対応することを確かめよ．つぎのことがわかる（§27の記号）：

$$E_{n,n-1/2} = m\left(1 - \frac{e^4}{n^2}\right)^{1/2}, \qquad F = \text{定数} \times \rho^s \mathrm{e}^{-\rho}, \qquad G = -\nu F,$$

ただし $s = \sqrt{n^2 - e^4}$，$\kappa = me^2/n$，$\rho = \kappa r$，$\nu = \kappa/(E+m) \simeq e^2/2n$.

11. §27に述べた方法を使って，ディラック理論の予想する水素原子の準位を計算せよ．

12. 水素原子の準位の微細構造につきディラック理論が与えるものとクライン＝ゴルドン理論が与えるものとを，同じクーロン場のなかの同じ質量と同じ電荷をもつ粒子に対して比較せよ（問題2を参照）.

13. 水素原子の準位 $2s_{1/2}$，$2p_{1/2}$，$2p_{3/2}$ に対して，(202) による v^2/c^2 程度の相対論的補正を計算せよ．この近似で $2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ は同じ準位にとどまることを確かめ，これらの結果を §27の厳密な取り扱いによって得られる結果と比較せよ．

第21章 電磁場の量子化. 輻射の理論

Se non è vero, è bene trovato
（たとえ本当でなくても，独創は美しい）

§1. 序 説

この最後の章には二つの目的がある．一つは，量子化された場の概念そのものに読者を親しませ，場の量子論とその物理的意味，またその成果と限界について一とおりの説明を与えることである．もう一つは，量子論による電磁輻射の基礎的な取り扱い方，さらに原子系および核系と輻射との相互作用効果の基礎的な取り扱い方を示すことである．

場の量子論をつくるためにわれわれがとる方法は，粒子系に関する非相対論的量子論をつくったときの方法と同じである．この方法は対応原理に基づき，古典場に関するハミルトンの正準形式論を出発点とするものであった．今度は無限大の自由度をもつ系にそれが適用されるということだけから違いが生じる．こうして得られる形式論は普通ハミルトニアン形式論と呼ばれる．

その主な欠点は形式的に共変でないことにある (1)．古典場の共変な方程式から出発し，この共変性を保つような量子化の方法をとることによって，この理論を完全に共変な形式に書き表わすこともできる．このような定式化から得られる利益については，実用的にも概念構成の上からも議論の余地はない．この場合，われわれが取り扱う式は簡潔で対称的な形を自動的に保ち，このことだけから多くの計算が簡単になる．その代り，この共変形式論は大がかりな数学的手段の準備を必要とする．ハミルトニアン形式論はもっと親しみやすい概念に訴えるから，この方が入門には適している．

この章は四つの節に分かれる．初めの二つは最も簡単な型の場，すなわち実スカラー場に当てられる．第I節は自由場を取り扱う．ここでは古典場とそのいろいろな変量を量子化する方法，状態空間の定義，こうして得られた量子的状態の解釈を与える．第II節では，このような場と粒子系の相互作用を考え，この簡単な模型について，原子系または核系と相互作用している場に特有の性質を調べる．この節で取り扱ういくつかの応用例は，場の量子論の方法，物理的意味およびその困難を説明するのに適したものが選ばれてい

(1) このことはもちろん，相対性原理が満たされていないことを意味するのではない．しかしこの理論の相対論的不変性は自明の事実ではなく，証明を要求される事柄である．この証明には立ち入らない．

る．あとの2節は電磁輻射に当てられる．第Ⅲ節は古典論の復習である．量子論とその応用は第Ⅳ節で簡潔に取り扱われる．スカラー場に関する技巧と議論の大部分は，輻射についても容易に拡張される．それゆえこれらの部分は大筋を繰り返すにとどめ，何よりもまず相違点を強調する．これらの相違は電磁ポテンシャルのベクトル的性格と，光子の質量が0であるという事実からくるものである (2).

I．実スカラー場の量子化

§2. 古典自由場．規準振動

古典的な実スカラー場は，空間の各点 $\boldsymbol{r}$ において各時刻 t に対応する振幅 $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ を与えることによって定められる．これは無限大の自由度をもつ力学系とみなされる．空間の各点 $\boldsymbol{r}$ にこの系の特殊な〔一般〕座標，すなわちこの点における場の振幅が対応する．

このような系の力学は有限個の自由度をもつ系の力学と本質的に違わない．しかしこれらの座標は連続なパラメーター——たとえば点 $\boldsymbol{r}$ の3成分 x, y, z——によって区別されているから，時間に関する微分演算は偏微分演算に置き換えられる．系の時間的変化は

$$\ddot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)\equiv\partial^2\Phi/\partial t^2=F[\Phi(\boldsymbol{r},t),\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)]$$

の形式の運動方程式によって支配される．ここで F は振幅 $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ とその偏導関数 $\dot{\Phi}\equiv\partial\Phi/\partial t$ の汎関数を表わし，Φ と $\dot{\Phi}$ の値は同じ時刻 t におけるものである．それゆえ，初期時刻 t_0 における系の位置と速度，すなわち座標 $\Phi(\boldsymbol{r},t_0)$ と時間に関するその変化率

$$\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t_0)\equiv\left.\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right|_{t=t_0}$$

の全体が与えられれば，各瞬間における系の力学的状態は確定する．

非同次ローレンツ群に属する変換に関して不変なすべての運動方程式のうち，最も簡単な

(2) 量子電気力学については数多くの取り扱い方がある．特に，W. HEITLER, *The Quantum Theory of Radiation*, Oxford University Press, 第2版, 1944 (邦訳；ハイトラー《輻射の量子論 上・下》沢田克郎訳，吉岡書店)；J. M. JAUCH と F. RÖHRLICH, *The Theory of Photons and Electrons*, Addison Wesley, Cambridge, 1956；W. E. THIRRING, *Principles of Quantum Electrodynamics* (J. BERNSTEIN によるドイツ語からの訳), Academic Press, New York, 1958 をあげておく．Heitler はハミルトニアン形式論を使い，原子物理学に対するこの理論の主な応用を詳しく扱っている．Jauch と Röhrlich の本では，共変形式論についての完全な解説のほかその応用についての完全な紹介も与えられている．Thirring の本には共変形式論全体の展望，その物理的意味と困難についての掘り下げた議論がある．特に場の演算子の測定可能性に関しては，N. BOHR と L. ROSENFELD の古典的な論文，*Det. Klg. Danske Viddenskab. Selskab.*, **12** (1933), No. 8 および *Phys. Rev.*, **78** (1950), 794 を参照することもできよう．

ものはクライン＝ゴルドン方程式

$$[\Box+\mu^2]\Phi\equiv\ddot{\Phi}-\triangle\Phi+\mu^2\Phi=0 \qquad (1)$$

である．これは Φ に関して線形同次であり，自由場の変化の法則を表わす．μ は定数である．これは量子化された場に結びつけられた粒子の質量であることがのちにわかるであろう（§6を見よ）．

仮にこの方程式の左辺が $\triangle\Phi$ の項を含まないものとすれば，この系のいろいろな座標は互いに関係なく変化し，各座標は振動数 μ の調和振動を行ない，その振幅と位相は初期条件によって定まるであろう．項 $\triangle\Phi$ の存在によって，これらの調和振動が互いに作用をおよぼしあうことになる．

規準座標の導入によって，このように結びつけられた振動子の集合を互いに独立な振動子の集合に変換することができる．これからしようとするのはこのことである．

エルミート演算子（$-\triangle$）の固有値方程式を考え，これを満たす $\boldsymbol{r}$ の実関数から成る完全直交規格化列の一つを $f_1, f_2, \cdots, f_i, \cdots$ とする．固有値のスペクトルは0から $+\infty$ までひろがっている．関数 f_i に対する固有値を k_i^2 で表わす．したがって

$$(\triangle+k_i^2)f_i=0 \qquad (2)$$

$$\int f_i(\boldsymbol{r})f_j(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\delta_{ij} \qquad (3)$$

$$\sum_i f_i(\boldsymbol{r})f_i(\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \qquad (4)$$

直交条件 (3) と完全性条件 (4) から，つぎの展開が導かれる：

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\sum_i q_i(t)f_i(\boldsymbol{r}) \qquad (5)$$

$$q_i(t)=\int f_i(\boldsymbol{r})\Phi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \qquad (6)$$

量 $q_1, q_2, \cdots, q_i, \cdots$ が求める規準座標である．実際，(6) と (1) から

$$\ddot{q}_i+\omega_i^2 q_i=0, \qquad (7)$$

ただし

$$\omega_i=(k_i^2+\mu^2)^{1/2} \qquad (8)$$

が導き出される．それゆえ各 q_i の運動方程式は確かに独立な調和振動子の方程式であり，対応する振動数は ω_i である．(5) によって，場の振幅はこれらの独立な振動子の線形重ね合わせである．

いままでのところ，われわれは基底関数 f がとびとびの添字によってしるしづけられるものと仮定してきた．実際には，演算子（$-\triangle$）は（0から $+\infty$ までひろがった）連続スペクトルをもつから，これらの基底関数はいくつかの添字の組によって決まり，そのうちの少なくとも一つは連続である．連続な添字を使ってさきほどの議論をし直すのはやさしい．いくつかの自明な修正や細部における修正——ここではそれに立ち入らない——を

除けば，結果は本質的に同じである．しかし，連続な添字の存在によって量子的な取り扱いはいちじるしく複雑になる．この種の複雑さを避けるために，われわれの考える場は空間のある有限な体積の部分で定義され，この部分を包む表面の上で適当に選ばれた条件を満たすものであるとし，われわれの決定したいすべての物理量は，この部分の体積を限りなくひろげることによって，すでに計算された量から導き出されると仮定しよう．この種の技巧はすでに第5章 §11 で説明されている．これは明らかに厳密でない．これによって理論の不変性が部分的に失われることに注意を払うがよい．

§3.　自由場の量子化

規準座標に移ると，実スカラー場の量子化に対するきわめて簡単な方法が示唆される．それは古典場における規準振動の一つ一つのモード (mode) に，同じ振動数をもつ量子的振動子を一つずつ対応させることである（第12章を見よ）．

この対応をつけるために，規準座標に関して古典ハミルトニアンをつくる．q_i の共役運動量を p_i とすれば，方程式 (7) はハミルトンの方程式

$$\dot{q}_i = p_i, \qquad \dot{p}_i = -\omega_i^2 q_i$$

に同値である．これを得るには，i 番目の自由度に関するハミルトニアンとして

$$h_i = \frac{1}{2}(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2) \tag{9}$$

をとればよい．これから全ハミルトニアンを表わす式は

$$H = \sum_i h_i \tag{10}$$

となる．

対応する量子場を得るには，実の力学変数 q_i, p_i をオブザーバブルに換え，これらが交換関係 ($\hbar = 1$)

$$[q_i, p_i] = \mathrm{i}\delta_{ij} \tag{11}$$

を満たすとする．

振動の各モードには式

$$E_{n_i} = \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i \qquad (n_i = 0, 1, 2, \cdots, \infty) \tag{12}$$

によって定められる等間隔な準位のとびとびの列が対応する．ここで消滅演算子と生成演算子をつぎのように導入し，それぞれ b_i, $b_i^\dagger$ で表わそう：

$$b_i = (2\omega_i)^{-1/2}(\omega_i q_i + \mathrm{i}p_i), \qquad b_i^\dagger = (2\omega_i)^{-1/2}(\omega_i q_i - \mathrm{i}p_i). \tag{13}$$

オブザーバブル間の交換規則 (11) は共役エルミート演算子間の交換規則

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij} \tag{14}$$

に同値であり，h_i の固有ベクトル列は基底固有ベクトルに $b_i^\dagger$ を繰り返し施すことによって得られる（第12章（20）を見よ）．

H の固有状態の完全列は，部分ハミルトニアン $h_1, h_2, \cdots, h_i, \cdots$ の固有状態のテンソル積をつくることによって得られる．各状態は量子数の列 $n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots$ によってしるしづけられ，そのエネルギーは部分エネルギーの和

$$E_{n_1 n_2 \cdots n_i \cdots} = \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right)\omega_i \tag{15}$$

である．その固有ベクトルを1に規格化したものは，基底状態を表わすベクトル $|0\rangle$ ($n_1 = n_2 = \cdots = n_i = \cdots = 0$) から公式

$$|n_1 n_2 \cdots n_i \cdots\rangle = \prod_i \frac{(b_i^\dagger)^{n_i}}{(n_i!)^{1/2}}|0\rangle \tag{16}$$

によって導き出される．

古典関係（5）から対応によって導き出される式

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_i q_i f_i(\boldsymbol{r}) \tag{17}$$

は一つのエルミート演算子を定める．これが点 $\boldsymbol{r}$ における場である．これを b_i, $b_i^\dagger$ の関数として表わすと便利である．すなわち(13) と（17）から，

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_i (2\omega_i)^{-1/2}(b_i + b_i^\dagger) f_i. \tag{18}$$

いままでのところ，場は量子化された振動子の集合として現われた．さきに考えた定常状態においては，各量子数 n によって特定の規準振動のモードに関する振動量子の個数が表わされる．しかし H の各固有状態にも，もっと一般にこの系の各演算子にも粒子的解釈を与えることができるのであって，その解釈の本質は第12章§6で説明したとおりである．このとき n_i はエネルギー ω_i の状態 f_i にある〈粒子〉(*) の個数を表わす．これは，

$$N_i = b_i^\dagger b_i \tag{19}$$

によって定義される演算子 N_i，すなわち《状態 f_i にある〈粒子〉の個数》を表わす演算子の固有値である．ここで b_i は状態 f_i にある〈粒子〉の消滅演算子，$b_i^\dagger$ は状態 f_i にある〈粒子〉の生成演算子である．

与えられた力学的状態の全エネルギーがこの状態に現われる各〈粒子〉のエネルギーの和にならない限り，上記の解釈は首尾一貫しない．そのためには，すでに第12章§6で示したように，(10) の右辺の和の各項 h_i から定数 $\omega_i/2$ を引いておけばよい．ハミル

(*) ［訳注］ 原著者は場の量子化によって生じる粒子（光子など）を corpuscule と言い，場と相互作用する粒子（電子など）を particule と呼んで区別している．われわれは前者に括弧をつけて〈粒子〉と書くことにする．

トニアンをこのように修正しても運動方程式に影響しないことは明らかである．新しいハミルトニアンは期待通りの性質をもつ．事実，

$$H = \sum_i N_i \omega_i \tag{20}$$

が成り立つのである．特に真空はエネルギー0の状態である．また，ベクトル $b_i^\dagger|0\rangle$ はただ一つの〈粒子〉を含む状態を表わし，そのエネルギーは確かにこの〈粒子〉のエネルギー ω_i である．

ここで問題になっている〈粒子〉は見分けられない粒子である．実際，これらの〈粒子〉が占めうる個別的状態 $f_1, f_2, \cdots, f_i, \cdots$ の一つ一つについて，この状態にある〈粒子〉の個数 $n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots$ を与えることにより，系全体の力学的状態は完全に決定される．またこれらの《粒子数 (nombre d'occupation)》は0から $+\infty$ までのすべての整数値をとることができる．それゆえこれらの〈粒子〉はボース＝アインシュタイン統計にしたがう(第14章，§6を参照)．すなわち，量子化された場は個数の定まらないボース粒子の系を表わす．

最後に，この系の基底状態に関する注意を一つ述べる．この真空状態は古典的な意味の真空と根本的に異なる．古典場の場合，真空あるいはエネルギー最小の状態とは，すべての点において場が0になった状態である．量子化された場の場合には，与えられた一点における場 $\Phi(\boldsymbol{r})$ はハミルトニアンと交換しない一つの演算子である．真空状態に関するその平均値が0になることは，b_i と $b_i^\dagger$ の性質を使えば容易に確かめられる．しかしその標準偏差は0と異なるのである．実際，場を表わす式 (18) を使えば，

$$\langle \Phi^2(\boldsymbol{r}) \rangle_0 = \sum_i \sum_j \frac{1}{2} (\omega_i \omega_j)^{-1/2} \langle 0 | (b_i + b_i^\dagger)(b_j + b_j^\dagger) | 0 \rangle f_i(\boldsymbol{r}) f_j(\boldsymbol{r})$$

が得られ，また

$$\langle 0 | (b_i + b_i^\dagger)(b_j + b_j^\dagger) | 0 \rangle = \langle 0 | b_i b_j^\dagger | 0 \rangle = \delta_{ij}$$

であるから，

$$\langle \Phi^2 \rangle_0 = \sum_i \frac{f_i^2(\boldsymbol{r})}{2\omega_i}$$

となる．右辺の級数の項はすべて正である．それゆえこれは0と異なる正の量である．実際には，この級数は発散することが示されるのである (3)．発散する量が現われるのは無限大の自由度をもつ系に特有の性質である．これが場の理論に対する重大な困難の源にな

---

(3) これに反して，有限な体積の部分における場の積分は有限なゆらぎをもつ．このゆらぎは積分範囲が小さくなるほど増大し，積分範囲が1点に収縮する極限において無限大となる（問題1を参照）．

っている．第 II 節でこの点にたちもどる機会があろう．

§4. 場のラグランジュ関数．$\Phi(r)$ の共役モーメント

さきへ進む前にもう一度古典的な場の概念にもどり，無限大の自由度をもつこのような型の系にまでラグランジュとハミルトンの形式論を拡張することについて簡単に述べておく．座標がとびとびの添字によってしるしづけられているならば，この拡張は自明である．それは規準座標を導入したときに使った方法である．微妙な問題が起こるのは，考えている座標が連続的な添字に依存するとき，特に場の《位置》が空間の各点における振幅を与えることによって定められているときである．そしてわれわれがいま興味をもつのは，座標がこのように選ばれている場合である．

ラグランジュ関数 L は系の座標と速度成分の関数である．いまの場合，それは Φ と $\dot{\Phi}$ の汎関数である．われわれはこれが

$$L = \int \mathcal{L}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{21}$$

の形の式で表わされると仮定する．ラグランジュ関数密度 $\mathcal{L}$ は Φ, $\operatorname{grad}\Phi$ の 3 成分および $\dot{\Phi}$ を媒介として $\boldsymbol{r}$, t に依存する．すなわち

$$\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}(\Phi, \partial\Phi/\partial x^k, \dot{\Phi}).$$

L がわかれば，作用積分

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L\,\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\,\mathcal{L}$$

が定義される．これは $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ の汎関数の一つである．運動方程式は最小作用の原理（第1章 (12)）によって与えられる．すなわち

$$\text{条件}\ \delta\Phi(t_1) = \delta\Phi(t_2) = 0\ \text{のもとに}\quad \delta I = 0. \tag{23}$$

関係 (22) を調べれば明らかなように，$\mathcal{L}$ がローレンツ群の変換に対しスカラーとして振舞うならば，上に述べた変化の法則は相対性原理にしたがう．この条件を $\mathcal{L}$ に課することによって，ラグランジュ関数を求めるのが非常にやさしくなる．

いまの場合，ラグランジュ方程式に置き換えられるものは，振幅 $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ に関する一つの偏微分方程式，最小作用の原理から容易に導かれる方程式である．すなわち

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Phi}} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\Phi/\partial x^k)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} = 0. \tag{24}$$

これが場の変化の方程式である．

ある程度の厳密さで場の座標を定義するためには，空間が無限に小さい細胞に分割されていると考えなければならない．各細胞 $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r})$ に対応して系の座標すなわち $\Phi(\boldsymbol{r}, t)$

$d\boldsymbol{r}$ という量が定まる．この座標が時刻の関数として変わる様子は変化の法則によって定められる．こうしておけば，座標 $\Phi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}$ の共役モーメント $\Pi(\boldsymbol{r},t)$ は普通の定義通り，速度 $\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}$ の成分に関する L の汎関数的導関数によって与えられる．すなわち，

$$\Pi(\boldsymbol{r},t) \equiv \frac{\delta L}{\delta\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\Phi}}. \tag{25}$$

ここで使った汎関数的微分法の概念は偏微分法の概念の自然な拡張である．たとえば上の等式における δL は，点 $\boldsymbol{r}$ を囲む体積 $d\boldsymbol{r}$ の小領域において $\dot{\Phi}$ が無限に小さい量 $\delta\dot{\Phi}$ だけ変化し，空間の他の部分ではまったく変わらないとしたとき (*)L に生じる変分である．

各座標に対して共役モーメントを定めてしまえば，普通の定義（第1章 (13)）を当てはめてハミルトン関数 H がつくられる．これは Φ と Π の汎関数

$$H \equiv H[\Phi,\Pi] \equiv \int \Pi\dot{\Phi}\,d\boldsymbol{r} - L,$$

すなわち

$$H = \int \mathcal{H}\,d\boldsymbol{r}, \qquad \mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(\Phi, \partial\Phi/\partial x^k, \Pi) = \Pi\dot{\Phi} - \mathcal{L} \tag{26}$$

である．$\mathcal{H}$ はハミルトン関数密度と呼ばれる．ハミルトンの正準方程式は

$$\dot{\Phi} = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Pi}, \qquad \dot{\Pi} = -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Phi} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\partial\Phi/\partial x^k)} \tag{27}$$

となる（第1章 (14) を参照）．

自由スカラー場の場合には，ラグランジュ関数密度として

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}[(\partial_\mu\Phi)(\partial^\mu\Phi) - \mu^2\Phi^2] = \frac{1}{2}[\dot{\Phi}^2 - (\nabla\Phi)^2 - \mu^2\Phi^2] \tag{28}$$

をとることができる．事実，この式を方程式 (24) に代入すれば方程式 (1) が得られる．

この場合 Φ の共役モーメントは

$$\Pi = \dot{\Phi} \tag{29}$$

である．定義 (26) を適用すれば，ハミルトン関数を表わす式として

$$H = \frac{1}{2}\int(\Pi^2 + (\mathrm{grad}\,\Phi)^2 + \mu^2\Phi^2)d\boldsymbol{r} \tag{30}$$

を得る．

いま定義した関数 H は，(10) により規準座標の関数として与えられるものと同じである．これを示すには，Φ と Π を q_i と p_i の関数として展開し，関数 f の性質を利用すればよい．Φ の展開は (5) によって与えられる．Π については定義 (25) を参照して，

(*)　［訳注］ Φ, $\partial\Phi/\partial x^k$ はもちろん動かさない．

$$\Pi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{\delta L}{\delta\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)}=\sum_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\frac{\delta\dot{q}_i}{\delta\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)}$$

が得られる．定義から $p_i=\partial L/\partial\dot{q}_i$ であり，(6) によれば

$$\dot{q}_i=\int f_i(\boldsymbol{r})\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

であるから，

$$\delta\dot{q}_i/\delta\dot{\Phi}(\boldsymbol{r},t)=f_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r},$$

したがって

$$\Pi(\boldsymbol{r},t)=\sum_i p_i f_i(\boldsymbol{r}). \tag{31}$$

それゆえ，上に得られた式を代入すれば，

$$H=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left[p_ip_j\int f_if_j\mathrm{d}\boldsymbol{r}+q_iq_j\int(\nabla f_i\cdot\nabla f_j)\mathrm{d}\boldsymbol{r}+\mu^2q_iq_j\int f_if_j\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right]. \tag{32}$$

部分積分を施してから (2) を適用すれば，

$$\int(\nabla f_i\cdot\nabla f_j)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=-\int f_i\triangle f_j\mathrm{d}\boldsymbol{r}=k_i^2\int f_if_j\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

この式を (32) の右辺に代入し，f の直交関係（式 (3)）と ω_i の定義（式 (8)）を使えば，最後は上に述べた結果

$$H=\frac{1}{2}\sum_i(p_i^2+\omega_i^2q_i^2)$$

に到達する［この式と (20) とは無限大の定数だけ違うことに注意する］．

場を量子化するためには，基本の変数として q_i と p_i，b_i と $b_i^\dagger$，$\Phi(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{r})$ のうちどれをとってもよい．また Φ と Π の交換関係はごく簡単な形をしている．これを b と $b^\dagger$ の交換関係から導き出そう．(13) から

$$p_i=\frac{1}{2}\mathrm{i}\sqrt{2\omega_i}(b_i^\dagger-b_i)$$

が出る．この式を展開 (31) に代入すると，

$$\Pi(\boldsymbol{r})=\sum_i\frac{1}{2}\mathrm{i}\sqrt{2\omega_i}(b_i^\dagger-b_i)f_i \tag{33}$$

を得る．求める交換関係は展開 (18) と (33)，b と $b^\dagger$ の交換関係，完全性関係 (4) を使えば得られる．結果は

$$[\Phi(\boldsymbol{r}),\Phi(\boldsymbol{r}')]=[\Pi(\boldsymbol{r}),\Pi(\boldsymbol{r}')]=0,\qquad[\Phi(\boldsymbol{r}),\Pi(\boldsymbol{r}')]=\mathrm{i}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{34}$$

§5. 複素基底関数

§4 の考察によって，規準座標に移らないで場を量子化するにはどうすればよいかが示

された．しかしながら，規準座標を用いると量子化された場の理論の計算ばかりでなく，解釈そのものさえ容易になることが非常に多い．実際には，演算子（$-\triangle$）の固有値が縮退しているから，基底関数と規準座標の選び方には大きな任意性がある．他方，ごく簡単な一般化をしておけば，複素基底関数を使って量子化を行なうこともできる．この §5 では，まずこの一般的な量子化の方法を説明し，さらにこの方法で量子化された場は基底関数の選び方に無関係であることを示す．

$u_1, u_2, \cdots, u_s, \cdots$ によって基底関数の完全直交規格化列を表わし，対応するエネルギーを ω_s とする．その結果（式 (2), (3), (4), (8) を参照），

$$\int u_s^* u_t \, \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{st}, \qquad \sum_s u_s(\boldsymbol{r}) u_s^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{35}$$

$$(\triangle + k_s^2) u_s = 0 \tag{36}$$

$$\omega_s = (k_s^2 + \mu^2)^{1/2} \tag{37}$$

が成り立つ．各モード u_s にエルミート共役な二つの演算子 a_s, $a_s^\dagger$ が結びつけられる．これらの演算子は交換規則

$$[a_s, a_t] = [a_s^\dagger, a_t^\dagger] = 0, \qquad [a_s, a_t^\dagger] = \delta_{st} \tag{38}$$

にしたがい（式 (14) を参照），これらによって系の力学的状態の空間をつくることができる．こうして各モード u_s に量子化された調和振動子が結びつけられている．a_s と $a_s^\dagger$ はそれぞれ状態 u_s にある〈粒子〉の消滅および生成演算子と解釈される．系のオブザーバブルは消滅および生成演算子の関数である．特にオブザーバブル

$$N_s \equiv a_s^\dagger a_s$$

は状態 u_s にある〈粒子〉の個数を表わす．場 $\Phi(\boldsymbol{r})$ は展開

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_s (2\omega_s)^{-1/2} (a_s u_s(\boldsymbol{r}) + a_s^\dagger u_s^*(\boldsymbol{r})) \tag{39}$$

によって与えられ（式 (18) を参照），場の共役モーメント $\Pi(\boldsymbol{r})$ は展開

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = \sum_s \frac{1}{2} \mathrm{i} (2\omega_s)^{1/2} (a_s^\dagger u_s^*(\boldsymbol{r}) - a_s u_s(\boldsymbol{r})) \tag{40}$$

により（式 (33) を参照），系の時間的変化を支配するハミルトニアン H は

$$H = \sum_s a_s^\dagger a_s \omega_s \tag{41}$$

によって与えられる（式 (20) を参照）．

これらの a および $a^\dagger$ と §3 の演算子 b および $b^\dagger$ とのあいだに関係をつけ，上に定義した系が §3 で定義した量子系と確かに同じものであることを示そう．

関数 u を互いに区別できるように選ばれた量子数の集合を s で表わしてきた．便宜上，この集合はエネルギーを指定する量子数と，同じエネルギーの値に対応する関数を互いに区別できるように選ばれた補助的な量子数の集合 σ から成るとする．エネルギーを指定するためには波数 k を使うのがよい．すなわち

$$\omega = (k^2 + \mu^2)^{1/2}. \tag{42}$$

こうすれば $s \equiv (k, \sigma)$ となる．

同様に，関数 f を互いに区別できるように選ばれた量子数の集合 i は，エネルギーを指定する波数 k とある補助的な量子数の集合 ρ から成る．すなわち $i \equiv (k, \rho)$.

k の決まった値に対応する（いくつかの）関数 $f_{k\rho}$ から，同じ k の値に対応する（いくつかの）関数 $u_{k\sigma}$ に移る変換はユニタリである．すなわち，

$$u_{k\sigma} = \sum_{\rho} T_{\sigma\rho} f_{k\rho}, \qquad f_{k\rho} = \sum_{\sigma} (T^{\dagger})_{\rho\sigma} u_{k\sigma} \qquad (T \equiv \text{ユニタリ行列}). \tag{43}$$

今後問題になる量はいずれも k のはっきり決まった値に関するものであるから，書き方を簡明にするため添字 k を省略する．

展開 (18) と (39) が同じ演算子 $\Phi(\boldsymbol{r})$ を表わし，展開 (33) と (40) もまた同じ演算子 $\Pi(\boldsymbol{r})$ を表わすためには，任意の k の値に対して

$$\sum_{\sigma} a_{\sigma} u_{\sigma} = \sum_{\rho} b_{\rho} f_{\rho}$$

となることが必要十分である．(43) の 2 番目の式を考慮すれば，このことは

$$a_{\sigma} = \sum_{\rho} T^{*}_{\sigma\rho} b_{\rho} \tag{44}$$

すなわち

$$a^{\dagger}_{\sigma} = \sum_{\rho} T_{\sigma\rho} b^{\dagger}_{\rho} \tag{44†}$$

という関係と同値である．このようにして，一方では a と b のあいだの対応，他方では $a^{\dagger}$ と $b^{\dagger}$ のあいだの対応が付けられた．この対応は線形である．もっと詳しく言えば，生成演算子 $b^{\dagger}$ と $a^{\dagger}$ のあいだの線形対応（関係 (44†)）は基底関数 f と u のあいだの線形対応（式 (43)）と同じである．

関係 (44) と (44†) から，展開 (18) と (39) が同じ場 $\Phi(\boldsymbol{r})$ を表わすという結果が出る．この場を量子化するためにとられた二つの方法が同値であるためには，このときに定義された a と $a^{\dagger}$ が交換関係 (38) にしたがい，(20) によって定義されたハミルトニアン H がこれらの演算子の関数として展開 (41) によって表わされることが必要である．これら二つの結果は行列 T のユニタリ性を使って容易に証明される．実際，この性質から k のすべての値に対して，

$$[a_{\sigma}, a^{\dagger}_{\sigma'}] = \sum_{\rho\rho'} T^{*}_{\sigma\rho} T_{\sigma'\rho'} [b_{\rho}, b^{\dagger}_{\rho'}] = \sum_{\rho\rho'} T^{*}_{\sigma\rho} T_{\sigma'\rho'} \delta_{\rho\rho'} = \delta_{\sigma\sigma'},$$

したがって

$$[a_{s}, a^{\dagger}_{s'}] = \delta_{ss'}$$

が成り立つ．同様に，k のすべての値に対して，

$$\sum_{\sigma} a^{\dagger}_{\sigma} a_{\sigma} = \sum_{\rho\rho'} \sum_{\sigma} T_{\sigma\rho} T^{*}_{\sigma\rho'} b^{\dagger}_{\rho} b_{\rho'} = \sum_{\rho\rho'} \delta_{\rho\rho'} b^{\dagger}_{\rho} b_{\rho'} = \sum_{\rho} b^{\dagger}_{\rho} b_{\rho}.$$

これから期待通りの H の式が導かれる．

§6. 平面波．運動量の定義

いろいろな複素基底関数系のうちで特によく現われるのは平面波の系である．平面波はのちに示すように，はっきり決まった運動量をもつ個別状態に対応する．

とびとびの添字を導入するために，一辺の長さ L の立方体のなかにある場を考え，関数 u_s には立方体の境界において周期的であるという条件をつける．すなわち

$$u_s(L/2, y, z) = u_s(-L/2, y, z),$$

およびこれから変数 x, y, z の円置換によって導かれる条件である．これらは第5章 §11 に述べた周期性条件の簡単な一般化である．

このとき，基底関数として平面波

$$u_{\boldsymbol{k}} = L^{-3/2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{45}$$

をとることができる．この波の波数ベクトルは $2\pi/L$ の整数倍の成分

$$k_x = 2\pi n_x/L, \qquad k_y = 2\pi n_y/L, \qquad k_z = 2\pi n_z/L$$

をもつ．n_x, n_y, n_z にそれぞれ正または負のあらゆる整数値

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots$$

を与えると，基底関数の完全直交規格化系が得られる．これらの平面波の一つ一つに，消滅演算子 $a_{\boldsymbol{k}}$ と生成演算子 $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ を結びつける．場 $\Phi(\boldsymbol{r})$ は展開

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} (2\omega_{\boldsymbol{k}} L^3)^{-1/2} (a_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + a_{\boldsymbol{k}}^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}) \tag{46}$$

によって表わされ（式 (39) を参照），その共役モーメントは

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{i} \left(\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}}{2L^3}\right)^{1/2} (a_{\boldsymbol{k}}^\dagger \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}) \tag{47}$$

により（式 (40) を参照），ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}} (a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}}) \omega_{\boldsymbol{k}} \tag{48}$$

によって表わされる（式 (41) を参照）．いずれの場合も，和は $\boldsymbol{k}$ のとりうるすべての値，すなわち n_x, n_y, n_z のとりうるすべての値にわたる．

すでに第5章 §11 で説明したように，L を限りなく大きくすれば，正しい結果が得られる．この極限において和は積分に置き換えられる．小さい帯 $(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}+\delta\boldsymbol{k})$ のなかには，n_x, n_y, n_z のとりうる値が $(L/2\pi)^3 \delta\boldsymbol{k}$ 組だけ存在する．加えられる項を $\boldsymbol{k}$ の連続関数のように取り扱うことができるとすれば――またこれこそ $L \to \infty$ という極限移行の考えに沿うものであるが――和の記号 $\sum$ をすべて積分記号

$$\int (L/2\pi)^3 \mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

に置き換えることができる．$(L/2\pi)^3$ は波数ベクトルの空間における個別的状態の密度で

ある．多くの場合，準位密度という名は単位立体角と単位エネルギーに対する個別的状態の数を表わすために用いる．これはエネルギーの関数 $\rho_L(\omega)$ である．波数ベクトルが立体角 $(\Omega, \Omega+\mathrm{d}\Omega)$ の方向を向き，エネルギーが帯 $(\omega, \omega+\mathrm{d}\omega)$ にある状態の数は

$$\rho_L \mathrm{d}\Omega\, \mathrm{d}\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 \left(\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega}\right) \mathrm{d}\omega\, \mathrm{d}\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \omega\, k\, \mathrm{d}\omega\, \mathrm{d}\Omega,$$

したがって

$$\rho_L(\omega) = L^3 \omega k/(2\pi)^3 \tag{49}$$

である（第17章 (52) を参照）．

実際には，立方体の技巧をまったく用いないで，初めから全空間にひろがった平面波を利用することもできる．この場合波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ はすべての値を制限なくとることができ，問題の波は3個の連続な添字 k_x, k_y, k_z に依存する．クロネッカー記号による規格化は δ 関数による規格化に置き換えられる．

このときは基底関数として関数

$$u(\boldsymbol{k}) \equiv u(\boldsymbol{k}\,;\, \boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}/(2\pi)^{3/2}$$

をとり，これらの一つ一つにエルミート共役な演算子 $a(\boldsymbol{k})$ と $a^\dagger(\boldsymbol{k})$ を結びつける．いろいろな公式をさきにあげた公式から導き出すには，$u_{\boldsymbol{k}}$ をすべて $(2\pi/L)^{3/2} u(\boldsymbol{k})$ に，$a_{\boldsymbol{k}}$ を $(2\pi/L)^{3/2} a(\boldsymbol{k})$ に，記号 $\sum$ を $\int (L/2\pi)^3 \mathrm{d}\boldsymbol{k}$ に置き換えればよい．たとえば基底関数を特徴づける性質（式 (35), (36), (37) を参照）はつぎのように書かれる：

$$\int u^*(\boldsymbol{k}\,;\,\boldsymbol{r}) u(\boldsymbol{k}'\,;\,\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'), \qquad \int u(\boldsymbol{k}\,;\,\boldsymbol{r}) u^*(\boldsymbol{k}\,;\,\boldsymbol{r}') \mathrm{d}\boldsymbol{k} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'),$$

$$(\triangle + k^2) u(\boldsymbol{k}\,;\,\boldsymbol{r}) = 0, \qquad \omega(\boldsymbol{k}) = (k^2+\mu^2)^{1/2}.$$

演算子 a と $a^\dagger$ の交換関係は

$$[a(\boldsymbol{k}), a(\boldsymbol{k}')] = [a^\dagger(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = 0, \qquad [a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$$

である（式 (38) を参照）．場 $\Phi(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{r})$ は積分

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega}} (a(\boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + a^\dagger(\boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}})$$

$$\Pi(\boldsymbol{r}) = (2\pi)^{-3/2}\, \mathrm{i} \int \sqrt{\frac{\omega}{2}}\, \mathrm{d}\boldsymbol{k} (a^\dagger(\boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - a(\boldsymbol{k}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}})$$

によって表わされ（式 (39) と (40) を参照），ハミルトニアンは

$$H = \int a^\dagger(\boldsymbol{k}) a(\boldsymbol{k}) \omega(\boldsymbol{k}) \mathrm{d}\boldsymbol{k}$$

となる（式 (41) を参照）．

場の運動量 $\boldsymbol{W}$ と平面波による展開とのあいだに関係を付けることが残されている．

ベクトル演算子 $\boldsymbol{W}$ はその定義から第15章の公式 (41) によって無限小並進と関係づけ

られている．有限な並進 $\mathscr{T}(\boldsymbol{a})$（第15章，§9の記号）によって，一つの点 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0$ における場の振幅を与える演算子 $\Phi(\boldsymbol{r}_0)$ は $\Phi(\boldsymbol{r}_0+\boldsymbol{a})$，すなわちこの並進によって $\boldsymbol{r}_0$ から導かれる点における場の振幅を与える演算子に変換される (4)．同様に $\Pi(\boldsymbol{r}_0)$ は $\Pi(\boldsymbol{r}_0+\boldsymbol{a})$ に変換される．このオブザーバブルの変換規則を $\boldsymbol{a}$ が無限小ベクトル $\boldsymbol{\epsilon}$ に等しい場合に当てはめれば，

$$[(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{W}),\Phi(\boldsymbol{r}_0)]=\mathrm{i}(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla\Phi)|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0},\qquad [(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{W}),\Pi(\boldsymbol{r}_0)]=\mathrm{i}(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\nabla\Pi)|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0} \tag{50}$$

を得る．この交換規則は任意の $\boldsymbol{r}_0$ に対して満たされるはずのものであり，これによって $\boldsymbol{W}$ は付加的定ベクトルを除いて定められる．たとえば，x 軸方向の成分 W_x は交換関係

$$[W_x,\Phi(\boldsymbol{r}_0)]=\mathrm{i}\left.\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0} \tag{51}$$

$$[W_x,\Pi(\boldsymbol{r}_0)]=\mathrm{i}\left.\frac{\partial\Pi}{\partial x}\right|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0} \tag{52}$$

により定数を除いて定められる演算子である．上記の関係は

$$W_x=-\int\Pi\frac{\partial\Phi}{\partial x}\mathrm{d}\boldsymbol{r}+\text{定数} \tag{53}$$

のときに満たされる．さらに部分積分を施せば，同値な式

$$W_x=\int\frac{\partial\Pi}{\partial x}\Phi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}+\text{定数} \tag{54}$$

が得られる．実際，(53) を方程式 (51) の左辺に代入すれば，交換関係 (34) を考慮して，

$$\begin{aligned}\left[-\int\Pi(\boldsymbol{r})\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{r})}{\partial x}\mathrm{d}\boldsymbol{r},\Phi(\boldsymbol{r}_0)\right]&=-\int[\Pi(\boldsymbol{r}),\Phi(\boldsymbol{r}_0)]\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{r})}{\partial x}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\mathrm{i}\int\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\frac{\partial\Phi(\boldsymbol{r})}{\partial x}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\mathrm{i}\left.\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0}\end{aligned}$$

を得る．関係 (52) も W_x のところへ (54) を代入すれば満たされることがわかる．

W_y と W_z についても同じような表示が得られる．こうして $\boldsymbol{W}$ の3成分が定数を除いて与えられ，この定数も $\boldsymbol{W}$ がベクトル演算子であるという条件によって定められる．結局，場の運動量に対しては二つの同値な式

$$\boldsymbol{W}=-\int\Pi(\nabla\Phi)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{55}$$

$$=+\int(\nabla\Pi)\Phi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{56}$$

---

(4) 第15章§9で定義したオブザーバブル x の変換法則（第15章，注 (3) を参照）との違いに十分注意する．今の場合，$\boldsymbol{r}_0$ は一つのパラメータであって，場の振幅の測定が行なわれる空間内の点を指定するものである．

を得る［注意；古典理論からもこれと形式的に同じ運動量の定義が導かれる］.

W を演算子 a_k と $a_k^\dagger$ の関数として表わそう．そのためには，(55) の右辺にある Φ と Π のところにそれぞれの展開式（式 (46) と (47)）を代入し，平面波の直交関係を利用する．結果は

$$W = \frac{1}{2}\sum_k k(a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger - a_k a_{-k} - a_{-k}^\dagger a_k^\dagger),$$

あるいは，a と $a^\dagger$ の交換関係を考えて，

$$W = \sum_k (a_k^\dagger a_k)k + \frac{1}{2}\sum_k k(1 - a_{-k}a_k - a_{-k}^\dagger a_k^\dagger).$$

記号 $\sum_k$ は k のとりうるすべての値について加えることを示す．第二の和において，括弧のなかの式は k を $-k$ に変えても変わらないから，反対の向きをもつ k に対応する項は互いに消しあう．それゆえ第二の和は厳密に 0 である．したがって

$$W = \sum_k (a_k^\dagger a_k)k. \tag{57}$$

この式から，W と a および $a^\dagger$ との交換関係

$$[W, a_k] = -ka_k \tag{58}$$

$$[W, a_k^\dagger] = +ka_k^\dagger \tag{59}$$

が容易に導かれる．

状態 u_k にある〈粒子〉は運動量 k をもつということを要請すれば，(57)，(58)，(59) は容易に解釈される．$(a_k^\dagger, a_k)$ は状態 u_k にある〈粒子〉の個数であるから，公式 (57) は場の全運動量 W が場を構成する各〈粒子〉の運動量の和に等しいことを意味するにすぎない．同様に関係 (58) と (59) も，a_k と $a_k^\dagger$ がそれぞれ運動量 k をもつ〈粒子〉の消滅および生成演算子であるという解釈にうまく適合する．実際，$|w\rangle$ を全運動量の固有ベクトルで固有値 w に対応するものとしよう．(58) によりベクトル $a_k|w\rangle$ は（これが 0 でないとき，すなわち場が運動量 k の〈粒子〉を少なくとも一つ含むとき）つぎの固有値方程式を満たす：

$$Wa_k|w\rangle = a_k(W-k)|w\rangle = a_k(w-k)|w\rangle = (w-k)a_k|w\rangle.$$

同じようにして (59) から

$$Wa_k^\dagger|w\rangle = (w+k)a_k^\dagger|w\rangle$$

を得る．

この場に含まれる運動量 k の〈粒子〉はエネルギー $\omega = (k^2 + \mu^2)$ をもつことに注意する．それゆえこれは質量 μ の〈粒子〉である．

§7. 球面波．角運動量の定義

最も多くの機会に利用される基底関数は平面波であるが，球面波も同じくらいよく用いられる．このとき基底関数は

$$u_{klm} \equiv j_l(kr)\, Y_l^m(\theta, \varphi) \times \text{定数} \qquad (60)$$

という形をしており，連続な添字 k ととびとびの添字 l および m によって定まる．とびとびの添字だけを相手にするためには，場を半径 R の球のなかに限って，基底関数がこの球面上で0になるという条件を付ければよい．Rを限りなく大きくすれば正しい結果が得られる．

この新しい基底関数に対しても，前の §6 の取り扱いはすべてそのまま繰り返される．たとえば，球面波 u_{klm} によって表わされる状態にある〈粒子〉の消滅および生成演算子 a_{klm} および $a^{\dagger}_{klm}$ を導入する．また，決まった運動量をもつ個別的状態に平面波が結びつけられるのと同じように，決まった角運動量をもつ個別的状態に球面波が結びつけられる．場の全角運動量 $\boldsymbol{I}$ としては，式

$$\boldsymbol{I} = -\int \Pi(\boldsymbol{l}\Phi)\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad (61)$$

を得る．ここで $\boldsymbol{l}$ は演算子 $-\mathrm{i}(\boldsymbol{r} \times \nabla)$ を表わし，その右にある関数 Φ に対して

$$\boldsymbol{l}\Phi = -\mathrm{i}\boldsymbol{r} \times (\nabla\Phi)$$

のように作用する．上と同値な表示式

$$\boldsymbol{I} = \int (\boldsymbol{l}\Pi)\Phi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

を利用することもできる．演算子 a_{klm} と $a^{\dagger}_{klm}$ はそれぞれエネルギー $\omega = (k^2 + \mu^2)^{1/2}$ と角運動量 $(l\,m)$ をもつ〈粒子〉の消滅および生成演算子と解釈される．さらに，l と k の決まった値に対応する $(2l + 1)$ 個の演算子 $a^{\dagger}_{klm}$ は l 位の既約テンソル演算子の標準成分である．$(2l + 1)$ 個の演算子 a_{klm} は，順序と符号を別にして，エルミート共役なテンソル演算子の標準成分（第13章，§30 の定義）である．

§8. 空間および時間の反転

運動方程式を不変にする変換のなかには，空間および時間の反転も含まれる．これらの変換はいずれも，場 $\Phi(\boldsymbol{r})$ およびその共役モーメント $\Pi(\boldsymbol{r})$ の変換法則が得られれば完全に定められる．このとき変換を表わす（ユニタリまたは反ユニタリ）演算子は位相を除いて決まる．

<u>空間の反転</u>に関しては，問題の法則は

$$\Phi(\boldsymbol{r}) \longrightarrow \Phi(-\boldsymbol{r}), \qquad \Pi(\boldsymbol{r}) \longrightarrow \Pi(-\boldsymbol{r}) \qquad (\mathrm{I})$$

である．この法則はスカラー場に特有のものである．この変換を表わす演算子 S_0 は<u>ユニ</u>

タリである（それゆえ場の交換関係はこの変換によって保存される）．この理論における演算子はすべて Φ と Π の関数であるから，空間の反転によるそれらの変換法則は（I）から容易に導き出される．特に，平面波に結びついた演算子 a と $a^\dagger$ については，

$$S_0 a_{\boldsymbol{k}} S_0^\dagger = a_{-\boldsymbol{k}}, \qquad S_0 a_{\boldsymbol{k}}^\dagger S_0^\dagger = a_{-\boldsymbol{k}}^\dagger \tag{II}$$

が得られ，これらに与えられた解釈と一致する．

時間反転に関しては，場 Φ は保存され，その速度は符号を変えるから，法則は

$$\Phi(\boldsymbol{r}) \longrightarrow \Phi(\boldsymbol{r}), \qquad \Pi(\boldsymbol{r}) \longrightarrow -\Pi(\boldsymbol{r}) \tag{I$'$}$$

となる．この変換によって場の交換関係は符号を変えるから，この変換を表わす演算子 K は反ユニタリである．平面波に結びついた演算子 a と $a^\dagger$ の変換法則は（I′）から容易に導かれる．結果は

$$K a_{\boldsymbol{k}} K^\dagger = a_{-\boldsymbol{k}}, \qquad K a_{\boldsymbol{k}}^\dagger K^\dagger = a_{-\boldsymbol{k}}^\dagger \tag{II$'$}$$

となり，これらの演算子に与えられた解釈と一致する．それゆえ，これらの生成および消滅演算子は，空間の反転によっても時間反転によっても同じ形に変換される．しかしながら，これら二つの変換を混同しないように注意しなければならない．一方はユニタリ，他方は反ユニタリなのである．

関係（I）または（II）は S_0 を，関係（I′）または（II′）は K を定めるが，位相だけは決まらない．この任意さを除くために，これらの変換によってベクトル $|0\rangle$ が不変であること，すなわち

$$S_0|0\rangle = |0\rangle, \qquad K|0\rangle = |0\rangle$$

という規約を設ける．

II. 原子系との相互作用

§9. 粒子系との相互作用

今度は一つの粒子と相互作用している場を考える．ただ一つの粒子をいくつかの粒子の集合に置き換えても，これから述べることの本質は変わらない．

系全体，すなわち 粒子＋場，の力学変数は各部分の基底変数の関数である．粒子の基底変数としてわれわれはその位置ベクトル $\boldsymbol{R}$ と運動量 $\boldsymbol{P}$ をとる．話を簡単にするためスピンは0であるとする．場の基底変数については，$\Phi(\boldsymbol{r})$ と $\Pi(\boldsymbol{r})$ をとることもできるが，さきの §3－§7 で定義したような生成および消滅演算子の完全列をとることもできる．今後は，平面波への分解に関連して導入した演算子 $a_{\boldsymbol{k}}$ と $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$（§6を参照）をたびたび利用するであろう．

系全体の状態空間は粒子（particule）だけの状態空間 $\mathcal{E}_{\text{part.}}$ と自由な場（champ）の状態空間 $\mathcal{E}_{\text{ch.}}$ の積

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{part.}} \otimes \mathcal{E}_{\text{ch.}}$$

である．

系全体のハミルトニアン H は三つの項の和である．すなわち

$$H = H_{\text{part.}} + H_{\text{ch.}} + H'. \tag{62}$$

初めの2項は，二つの部分が完全に切り離されているときそれぞれの部分の変化を支配する項であり，最後の項は相互作用エネルギーを表わす．

たとえば $H_{\text{ch.}}$ は自由場のハミルトニアンである．これについてはいくつかの同値な表わし方がさきに与えられている．特に (48) を指摘しておく．$H_{\text{part.}}$ は場 Φ がないときにこの粒子の変化を支配するハミルトニアンである．具体的に考えるため，この粒子は一つのポテンシャルのなかに置かれているとし，その質量を M で表わす．われわれはつぎの仮定を設ける．すなわち，

$$M \gg \mu$$

という仮定と，この粒子の運動を非相対論近似で取り扱うことができるということ，言いかえれば，

$$H_{\text{part.}} = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + V(R) \tag{63}$$

という仮定である．

残されたのは H' の決定である．最も簡単なのは，粒子が存在する点 $\boldsymbol{R}$ において場の振幅がとる値に比例する相互作用を仮定することである．すなわち

$$H' = g\Phi(\boldsymbol{R}) \tag{64}$$

$$= gL^{-3/2}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}(a_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}) \tag{64'}$$

とするのである．g は次元をもたない定数で，**相互作用定数**と呼ばれる．H' を表わす第2式は第1式から展開 (46) を使って導かれる．

この特殊な相互作用の式は相対論的不変量についての考察からほとんど一意的に決められるものである．しかしながら，いま展開している理論は出発点から非相対論近似を含んでいる．このことは，われわれの考えている項 $H_{\text{part.}}$ が相対性原理の要求する共変性をもたないという事実だけに基づくのではない．実は，一つそしてただ一つの粒子から成る物質系——もっと一般に，はっきり決まった個数の粒子から成る系——という概念そのものが相対論的量子力学では正しくなくなるのである．この理論に対する上の二つの制限は，H' を選ぶに当たってつねに念頭に置かなければならない．ここでディラック方程式の非相対論近似に関する第20章の研究を道案内として利用することができる．この研究が示唆するところによれば，非相対論粒子と場の相互作用は (64) で与えられるような局所的相互作用ではなく，ある領域における場の値に依存する相互作用である．粒子の質量

M に対して，この領域は粒子が見いだされる点を囲み，$1/M$ 程度の大きさをもつ．その結果，H' を表わす式 (64) を

$$H' = g\int \Phi(\boldsymbol{r})\rho(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{65}$$

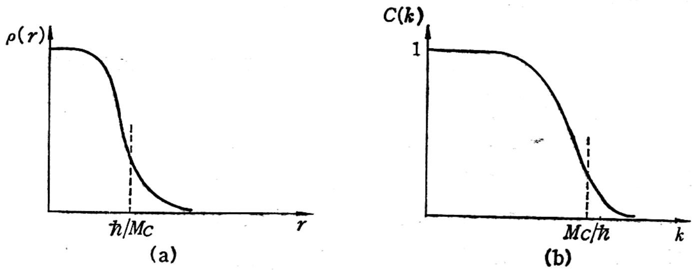
という式に置き換えるという考えに到達する．ここで $\rho(\boldsymbol{r})\equiv\rho(r)$ は球対称な実関数であり，規格化条件

$$\int\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \equiv 4\pi\int_0^\infty \rho(r)r^2\mathrm{d}r = 1$$

にしたがい，原点を中心とする半径 $1/M$ の領域に集中している (21・1 図(a) を参照)．(65) の右辺においてこの関数に $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ を代入すれば (64) の形にもどる．

つぎの式で定義される関数 $C(\boldsymbol{k})$ を切断関数 (fonction de coupure) と呼ぶ：

$$C(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$



21・1図　関数 $\rho(r)$ と $C(k)$ の概形．

これは球対称な実関数で，条件

$$C(0) = 1$$

を満たし，フーリエ変換のよく知られた性質により，点 $\boldsymbol{k}=0$ を中心とする半径 M の領域に集中している (21・1 図(b) を参照)．(65) の右辺の $\Phi(\boldsymbol{r})$ に展開 (46) を代入すれば，簡単な計算によって

$$H' = gL^{-3/2}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{C(k)}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}(a_{\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}) \tag{66}$$

を得る．この展開が展開 (64′) と異なるのは，各項に因数 $C(k)$ が現われる点だけである．この因数の本質的な効果は，高い振動数の項，すなわち $k \geq M$ に対する項から相互作用への寄与を切り捨てることである．

高い振動数をこのように除去することは，非相対論近似に対してつじつまがあう．実際，展開 (66) の各項は，粒子から場へ，また場から粒子へ運動量とエネルギーが一定量

移行することに対応する．$a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ を含む項の効果は，運動量 $\boldsymbol{k}$ とエネルギー $\omega_{\boldsymbol{k}}$ をもつ場の〈粒子〉を1個吸収し，その結果として場が失った運動量とエネルギーを粒子に移すことである．$a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ を含む項の効果は，運動量 $\boldsymbol{k}$ とエネルギー $\omega_{\boldsymbol{k}}$ をもつ場の〈粒子〉を生成し，粒子の運動量とエネルギーをその分だけ減らすことである．$k \gtrsim M$ となれば，この移行によって質量 M の粒子に関する個数保存の法則が破れ，場がこの粒子を吸収したり，もう一つ質量 M の粒子を生成したりする可能性が生じる．それゆえ非相対論近似が成り立つのは，このような高い振動数の項による寄与が無視できる場合だけであり，この近似から得られる結果が正しいとすれば，それは切断関数 $C(k)$ の導入によっても変わらないはずである．それゆえなおさら，この関数の形によって結果が大きく変わることはありえない．以下の計算では，

$$C(k)=\begin{cases}1 & (0\leqslant k\leqslant K \text{ のとき})\\ 0 & (k>K \text{ のとき})\end{cases} \tag{67}$$

とし，パラメータ K には M の程度の値を与える．

終りに H の不変性を吟味する．明らかに H' は，これを (65) によって定義すれば，全体（場＋粒子）のどんな変位に関しても不変である．事実，この演算子は系の全運動量 $\boldsymbol{P}+\boldsymbol{W}$ とも全角運動量 $(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P})+\boldsymbol{I}$ とも交換することが容易に確かめられる．反転によって $\Phi(\boldsymbol{r})$ が $\Phi(-\boldsymbol{r})$ に変換される（スカラー場）とすれば，H は反転に関しても不変である．$H_{\mathrm{ch.}}$ もまたこれらすべての不変性をもつ．$V(R)=0$ ならば，$H_{\mathrm{part.}}$ も，したがって H も同様である．$V(R)\neq 0$ ならば，$H_{\mathrm{part.}}$ は回転と反転に関してだけ不変である．それゆえ H 自体も回転と反転に関しては不変であるが，並進に関してはそうではない．

上に定義した量子系の利点は，電磁輻射の場と相互作用している1原子の本質的な性質がいっそう簡明な形でもう一度見いだされるということからくる．この場合，上に考えた粒子が原子の役割を，スカラー場が電磁輻射の役割を演じる．主な違いは，ここで研究した場の〈粒子〉のスピンは0，質量は有限であるのに，電磁場の〈粒子〉すなわち光子の質量は0，スピンは1に等しいということから生じる．この節の残りは，電磁場があるときの原子を考え，上記のごく簡単な模型によっていくつかの典型的な性質を研究することに当てられる．

§10. 弱い相互作用と摂動による取り扱い

g が十分小さいときには，H' を小さい摂動として取り扱い，第16章と第17章で展開した計算法を適用することができる．

摂動のないハミルトニアンは

$$H_0 \equiv H_{\mathrm{ch.}} + H_{\mathrm{part.}}$$

である．摂動論の方法は H_0 を対角型にする表現を用いる．われわれが採用する表現の基底ベクトルはつぎのようにして得られる．$H_{\mathrm{part.}}$ を空間 $\mathcal{E}_{\mathrm{part.}}$ の演算子と考え，その固有ベクトルからなる完全直交規格化列の一つを $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots, |\lambda\rangle, \cdots$ で表わし，対応する固有エネルギーを $E_\alpha, E_\beta, \cdots, E_\lambda, \cdots$ とする（小さい値から順に並べてあるとする）．空間 $\mathcal{E}_{\mathrm{ch.}}$ において〈粒子〉のない状態をベクトル $|0\rangle$ で表わし，上記の列に属する任意のベクトル $|\lambda\rangle$ に $|0\rangle$ を掛ければ，空間 $\mathcal{E}$ のベクトルを得るが，書き方を簡単にするためこのベクトルも $|\lambda\rangle$ で表わそう．明らかに

$$H_0|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle.$$

ベクトル $|0\rangle$ に生成演算子 $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ を繰り返し作用させれば，$\mathcal{E}_{\mathrm{ch.}}$ における $H_{\mathrm{ch.}}$ の固有ベクトルの完全直交規格化列を得る（(16) を参照）．同様に，上で定義したベクトル $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle, \cdots, |\lambda\rangle, \cdots$ の一つ一つに生成演算子 $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ を繰り返し作用させれば，$\mathcal{E}$ における H_0 の固有ベクトルの完全直交規格化列を得る．これが求める基底系である．この基底に属するベクトルを代表的に $|\boldsymbol{n}\rangle$ で表わし，対応する固有エネルギーを $E_{\boldsymbol{n}}$ で表わそう．すなわち

$$H_0|\boldsymbol{n}\rangle = E_{\boldsymbol{n}}|\boldsymbol{n}\rangle.$$

力学的状態 $|\boldsymbol{n}\rangle$ においては，粒子が $H_{\mathrm{part.}}$ のはっきり決まった一つの固有状態にあり，場ははっきり決まった運動量をもついくつかの〈粒子〉から成る．

実際には，今後問題になるベクトルはごく限られた数の〈粒子〉から成るものばかりであるから，これらに目じるしをつけるためには，粒子の力学的状態を特徴づけるギリシア文字と，場に含まれる各〈粒子〉の波数ベクトルの列を与えればよい．この記法によれば，$|\lambda\boldsymbol{k}\rangle$ は状態 λ にある粒子に運動量 $\boldsymbol{k}$ の〈粒子〉を一つ結びつけて得られる状態を表わし，$|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle$ は状態 λ にある粒子にそれぞれ運動量 $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ をもつ二つの〈粒子〉を結びつけて得られる状態を表わす，など．

$$H_0|\lambda\boldsymbol{k}\rangle = (E_\lambda + \omega_{\boldsymbol{k}})|\lambda\boldsymbol{k}\rangle, \qquad H_0|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle = (E_\lambda + \omega_{\boldsymbol{k}} + \omega_{\boldsymbol{k}'})|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle \tag{68}$$

に注意する．また

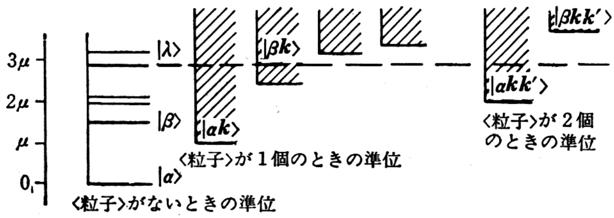
$$|\lambda\boldsymbol{k}\rangle = a_{\boldsymbol{k}}^\dagger|\lambda\rangle,$$

$\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$ ならば，

$$|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle = a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'}^\dagger|\lambda\rangle$$

が成り立つ．

ハミルトニアン H_0 の最も低いいくつかの準位の特徴は21・2図のスペクトル分析図表によって表わされる．この型の図表に関する習慣上の規約（11・1図（第2巻65頁），12・1



21・2図　H_0 の初めのいくつかの準位の特徴を表わす図表．

図（第2巻100頁）などを参照）にしたがい，基底より上の準位の高さは，その準位と基底準位のエネルギーの差に等しくしてある．したがって同じエネルギーをもつ準位は同じ高さに書かれている．図に示された準位は，対応する固有状態の性格によって分類されている．左端の列には〈粒子〉のない状態の準位が見いだされる．つぎにくる1〈粒子〉の準位はいくつかの列に分けられ，各列が粒子の量子状態の一つに対応する．最初の列は $|\alpha \boldsymbol{k}\rangle$ の準位に対応し，ここでは粒子が基底状態にある．これは（$L\to\infty$ となる極限において）連続な帯をつくり，その下端は運動量0の1〈粒子〉が存在する場合に対応する．したがって下端は $|\alpha\rangle$ の準位より距離 μ だけ上にある．つぎは状態 $|\beta\boldsymbol{k}\rangle$ に関する準位であり，これらに対しては粒子が最初の励起状態にある．以下同様である．1〈粒子〉に対する準位のつぎには2〈粒子〉に対する準位がくる．これも無限個の列に分けられ，各列が粒子のはっきり決まった量子状態に対応する．以下同様である．

摂動 H' の効果により，これらの準位は互いに結びつけられている．さきに定めた表現においては，この相互作用項が特に簡単な行列によって表わされる．実際，展開（66）を調べればわかるように，H' の行列要素のうち0でないものは，〈粒子〉の数が1個だけ違う基底ベクトルを結びつける要素だけである．またこれらの要素は生成および消滅演算子の性質を使って容易に計算される．特に，

$$\langle\lambda|H'|\nu\boldsymbol{k}\rangle=\langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle^*=(2\pi/L)^{3/2}g\frac{C(\boldsymbol{k})}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\langle\lambda|U(\boldsymbol{k})|\nu\rangle \qquad (69a)$$

$$\begin{aligned}\langle\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'|H'|\nu\boldsymbol{k}\rangle&=\langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle^*\\&=(2\pi/L)^{3/2}g\frac{C(\boldsymbol{k})}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\langle\lambda|U^\dagger(\boldsymbol{k}')|\nu\rangle \qquad (\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}')\end{aligned} \qquad (69b)$$

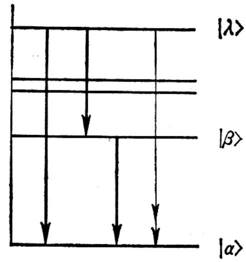
[$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$ ならば，(69b) の右辺に因数 $\sqrt{2}$ を付け加える必要がある]．ただし

$$U(\boldsymbol{k})\equiv\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}}{(2\pi)^{3/2}} \qquad (70)$$

と置いてある．

この相互作用が弱い場合でも，系のスペクトルには定性的な変化がもたらされる．特に

束縛状態の大部分が不安定になり，場の〈粒子〉をいくつか放出することによってもっと低いエネルギーの状態へ遷移を行なう可能性が生じる．たとえば21・2図に示された状態 $|\lambda\rangle$ を考える．この状態はいくつかの非束縛状態と同じ準位にある．すなわち $|\alpha\boldsymbol{k}\rangle$ 型または $|\beta\boldsymbol{k}\rangle$ 型の1〈粒子〉状態，$|\alpha\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'\rangle$ 型の2〈粒子〉状態などである．小さな摂動 H' の導入によって，束縛状態が1〈粒子〉状態に，1〈粒子〉状態が2〈粒子〉状態に，… 結びつけられる．その結果として状態 $|\lambda\rangle$ からこれと同じ高さにある連続スペクトルの状態への《放射性》遷移が起こりうる．状態 $|\lambda\rangle$ から起こりうるこれらの遷移を図式的に示せば21・3図のようになる．安定な束縛状態として残るものは，基底状態とくらべてエネルギーがあまり大きくないため，質量 μ の〈粒子〉を放出することがエネルギーの上で不可能な状態，すなわち $E_\alpha+\mu$ より低いエネルギーをもつ状態だけである．21・2図の例では基底状態だけが安定な状態である．



21・3図 $|\lambda\rangle$ 準位からの放射性遷移．右端にある二重の矢印線は，2〈粒子〉を放出して基底状態に遷移することを表わす．すなわち高位の遷移である．

相互作用項 H' の存在はまた束縛状態の準位にいくらかのずれをひき起こす．これはあとでわかるように2次の効果である．それにもかかわらず，粒子のいろいろな状態に時として現われる不安定性や《放射性》遷移のようすを考えるとき，H_0 のスペクトルの吟味からひき出される結論のうちのいくつかは，この効果によって影響されることもある．実際，準位がわずかにずれるだけでも，それまではエネルギー的に不可能であったいくつかの《放射性》遷移が可能になったり，その反対の結果が生じたりすることがありうる．

§11. 準位のずれ

第一の応用として，前の§10の終りに述べた準位のずれを計算してみる．この簡単な摂動の計算にも場の理論の本質的な困難が現われるのを見よう．これによって場の理論の物理的意味や限界をいっそうよく理解することができるであろう．

そこでわれわれは一つの安定な準位，たとえば基底準位を考え，定常的な摂動の方法を使って相互作用項 H' の存在によるずれを計算する．問題の準位に縮退はないと仮定する．実際には，H' が $H_{\text{part.}}$ の不変性をすべてもっているから，縮退のある準位の取り扱いにも根本的な相違はない．第1近似として，ずれは第16章の公式 (12) によって与えられる．さきに述べた H' の性質により，結果は0である．すなわち

$$\langle\alpha|H'|\alpha\rangle=0.$$

それゆえ，第2次まで計算を進める必要が生じる．第2次補正を δE_α で表わせば，

$$\delta E_\alpha = \langle \alpha | H' \frac{1}{E_\alpha - H_0} H' | \alpha \rangle \tag{71}$$

である（第16章，§6を参照）．

この式を計算するために，さきに定義した表現をとる．計算に入ってくる中間の状態は1〈粒子〉を含むものだけである．関係 (68)，(69a)，(70) を考慮すれば，順に

$$\begin{aligned}\delta E_\alpha &= \sum_n \langle \alpha | H' | n \rangle \frac{1}{E_\alpha - E_n} \langle n | H' | \alpha \rangle = \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} |\langle \alpha | H' | \nu \boldsymbol{k} \rangle|^2 / (E_\alpha - E_\nu - \omega_{\boldsymbol{k}}) \\ &= g^2 (2\pi/L)^3 \sum_\nu \sum_{\boldsymbol{k}} [(C^2(k)/2\omega_{\boldsymbol{k}}) |\langle \alpha | U_{\boldsymbol{k}} | \nu \rangle|^2 / (E_\alpha - E_\nu - \omega_{\boldsymbol{k}})]\end{aligned}$$

を得る．さらに §6 で述べた技法にしたがって $\boldsymbol{k}$ に関する和を積分に置き換え，(67) によって与えられた切断関数を使えば，つぎのようになる：

$$\delta E_\alpha = -g^2 \int_{k \leqq K} \mathrm{d}\boldsymbol{k} \sum_\nu (|\langle \alpha | U(\boldsymbol{k}) | \nu \rangle|^2 / 2\omega(\omega + E_\nu - E_\alpha)). \tag{72}$$

ここで

$$\delta E_\alpha < 0$$

であることに注意する．実際，準位 E_α は安定であるから

$$\omega + E_\nu - E_\alpha > 0$$

であり，その結果 (72) の右辺の括弧のなかは，どのような ν と $\boldsymbol{k}$ に対しても正となるからである．

$|\delta E_\alpha|$ の上の限界を求めるには，括弧のなかの分母において $(E_\nu - E_\alpha)$ をその最小値すなわち0に置き換えればよい（E_α は基底準位である）．このとき ν についての加法は，完全性関係 $\sum_\nu |\nu\rangle\langle\nu| = 1$ を使って容易に行なわれる．$UU^\dagger = (2\pi)^{-3}$ であるから，この和は $(2\pi)^{-3}/2\omega^2$ となる．ここで角に関する積分を行なえば，

$$|\delta E_\alpha| < (g^2/4\pi^2) \int_0^K (k^2/\omega^2) \mathrm{d}k \tag{73}$$

を得る．この積分は正確に計算することができる．$K \gg \mu$ であるから，積分は K よりわずかに小さく，したがって

$$|\delta E_\alpha| < g^2 K / 4\pi^2. \tag{74}$$

(72) の右辺をつぎのようにして評価することもできる．完全性関係を直接適用すれば，$U(\boldsymbol{k})$ をその定義式 (70) に置き換えて，

$$\delta E_\alpha = -\frac{g^2}{8\pi^3} \int_{k \leqq K} \langle \alpha | \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} (\omega + H_{\mathrm{part.}} - E_\alpha)^{-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} | \alpha \rangle \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{2\omega}\right) \tag{75}$$

を得る．ユニタリ演算子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$ は $\boldsymbol{R}$ と交換し，$\boldsymbol{P}$ を $(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{k})$ に変換する．したがって

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}H_{\text{part.}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}=\frac{(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{k})^2}{2M}+V(R)=H_{\text{part.}}+\frac{k^2}{2M}-\frac{(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{k})}{M}.$$

これから

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}(\omega+H_{\text{part.}}-E_\alpha)^{-1}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}=\left(\omega+\frac{k^2}{2M}+H_{\text{part.}}-E_\alpha-\frac{(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{k})}{M}\right)^{-1}.$$

この式を (75) の右辺に代入すれば，

$$\delta E_\alpha=-\frac{g^2}{8\pi^3}\int_{k\leqslant K}\langle\alpha|\left(\omega+\frac{k^2}{2M}+H_{\text{part.}}-E_\alpha-\frac{(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{k})}{M}\right)^{-1}|\alpha\rangle\frac{d\boldsymbol{k}}{2\omega}$$

を得る．右辺に現われた平均値において，項 $(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{k})/M$ を無視しても大きな誤差は生じない．状態 $|\alpha\rangle$ にある粒子の速度 $\boldsymbol{P}/M$ は平均して $\mathbf{1}$ よりはるかに小さいからである（非相対論近似）．この項を無視した上で，角について積分すれば，

$$\delta E_\alpha\simeq-\frac{g^2}{4\pi^2}\int_0^K\frac{k^2}{\omega^2}\left(1+\frac{k^2}{2M\omega}\right)^{-1}dk \tag{76}$$

となる．この式が (73) の右辺と異なるのは被積分関数のなかに因数 $(1+(k^2/2M\omega))^{-1}$ があることだけである．$\mu\ll K\approx M$ であるから，k が積分区間を動くあいだに，この因数はおおよそ 1 から $2/3$ まで減少する．したがって

$$\delta E_\alpha=-\frac{sg^2K}{4\pi^2}\qquad(s\lesssim1) \tag{77}$$

と書くことができる．この公式に現われる数値定数 s はおおよそ $2/3$ と 1 のあいだにある．

この効果の重要さを評価するために，われわれの模型に入ってくるいろいろな量が，原子において見いだされる程度の数値をとる場合に，どの程度の大きさになるかを計算してみよう [5]．このとき M は電子の質量，g^2 は微細構造の定数で，

$$g^2\simeq10^{-1}. \tag{78}$$

最も近い準位間の距離を D で表わせば，

$$D/M\simeq10^{-4}-10^{-5}. \tag{79}$$

これらの数値的なデータによれば，

$$|\delta E_\alpha/D|\approx g^2M/4\pi^2D\approx100.$$

これはずれの観測結果とくらべて桁違いに大きい効果である．このことから，摂動による取り扱いの妥当性と結果の物理的意味に対するきわめて深刻な疑問が生じる．

---

(5) 相互作用の形式が異なるために，スカラー理論によって与えられる数値上の結果は，輻射の量子論による結果と厳密には一致しない．比較できる事柄を対照するためには，定数 g^2 を決めるときに，双極子遷移の確率が原子における双極子遷移の確率と同じ程度の値をとるようにする（式 (81) と (245) を参照）．すなわち $g^2/4\pi\approx1/137$.

実を言うと，計算結果と実験データの対照は，これほど単純でもなく，これほど絶望的でもない．摂動のない準位の計算に入ってくる質量 M は実験によって観測される質量ではない．後者は《自由》粒子，すなわちポテンシャル $V(R)$ の有効範囲の外にある粒子についてエネルギーと運動量の測定を行なって得られるものである．しかしながらこのような《自由》粒子は場と相互作用をしており，したがって測定による結果が与えるのは

$$M_{\text{exp.}} = M + \delta M$$

である．ここで δM は，場が存在することにより《自由》粒子の静止エネルギーにもたらされる寄与を表わす．いまの場合，簡単な計算により

$$\delta M \approx -g^2 K/4\pi^2$$

が得られる．もっと正確には，δM の計算を2次の摂動まで計算すると (76) の右辺が得られる（問題2）．それゆえ，ずれ δE_α はほとんど全部がこのような質量の《くりこみ》効果によるのである [6]．

シュレーディンガーまたはディラックの理論によって水素原子の準位を計算するときには，電子の実験質量を使う．このことによって，輻射の場に対する電子の相互作用のきわめて大きい部分が考慮に入り，スペクトルの計算値が実測値とあれほど驚くべき一致を示した理由が説明される．

粒子のハミルトニアンにおいて，単に理論的質量を実験的質量（これは《くりこまれた》質量とも呼ばれる）に置き換えることから生じるずれを $\delta E_\alpha^{(0)}$ とすれば，《実験的に観測されるずれ》$\delta E'_\alpha$ は，計算されたずれ δE_α と $\delta E_\alpha^{(0)}$ との差である．われわれの模型では，この《くりこまれた》質量を代入することは，$H_{\text{part.}}$ を

$$\delta M + \frac{\boldsymbol{P}^2}{2(M+\delta M)} + V(R)$$

に置き換えることであり，その主な部分はすべての準位の集合に δM だけのずれをひき起こす．このことから

$$\delta E_\alpha^{(0)} = \delta M\left(1 - \langle\alpha|\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M^2}|\alpha\rangle\right)$$

が導かれる．摂動法を2次で止めるならば，$\delta E'_\alpha = \delta E_\alpha - \delta E_\alpha^{(0)}$ の計算に大きな困難はなく，$|\delta E'_\alpha/D|$ に対して 10^{-3} 程度の値が得られる．この程度の大きさは妥当である．

しかしながら，こうして得られる $\delta E'_\alpha$ の値をあまり信頼することはできない．それは切断関数の選び方により決定的に左右されるからである．それゆえ実際的な計算は完全に

(6) 切断を $K \approx M$ にとれば，$\delta M/M \approx 10^{-3}$ を得る．それゆえ質量の相対的変化はごく小さい．このことから，いまの問題に摂動法を使うことが経験的に正当化される．しかし切断関数を導入しないならば，δM を与える積分は発散する．この困難にはあとでもう一度たちもどるであろう．

相対論的な理論から出発する必要があろう．実は，ここに場の量子論の難問題が関連しており，現時点では満足すべき解決が知られていない．実際，相対論においては，相互作用は厳密に局所的であり，δM を表わす式として $\delta M = ZM$ が得られるが，Z は発散する積分である（注(6)を参照）．また δE_α と $\delta E_\alpha^{(0)}$ も発散する積分によって与えられ，その結果 $\delta E'_\alpha$ を表わす式は $\infty - \infty$ 型の不定形になる．

実際には，相対論的不変性を考慮して特別につくられた規則によりこの不確定さを取り除いている．こうして得られる結果は実験と驚くべき一致を示す(7)．しかしこのような計算法の真の根拠はまだ見いだされていない．

上に指摘した限界はあるけれども，われわれの簡単な模型によって多くの効果が予見され，正しく計算される．それゆえこの研究をもっと進めよう．質量の《くりこみ》効果は共変形式論の枠のなかでしか理論的に満足できる形で扱えないから，しばらく考えない．

§12. 〈粒子〉の放出

今度は相互作用 H' の存在によって不安定になる粒子の状態について調べる．

この §12 では，時間を含む摂動法（第17章，§4）を応用して，いろいろな《放射遷移》の単位時間における遷移確率を計算しよう．

具体的に考えるため，H_0 のスペクトルは21・2図のとおりであるとし，状態 $|\lambda\rangle$ を考える．エネルギーに関して起こりうる遷移は（21・3図），一つまたは二つの〈粒子〉の放出を伴う基底状態への遷移（$3\mu > E_\lambda - E_\alpha > 2\mu$）と，一つの〈粒子〉の放出を伴う第1励起状態への遷移（$2\mu > E_\lambda - E_\beta > \mu$）だけである．以下では，ただ一つの〈粒子〉の放出を伴う遷移だけを考える．2〈粒子〉の放出は高次の効果であり，すべての事情が同じときには，1〈粒子〉の放出よりも g^2 倍もまれにしか起こりえない．それゆえ摂動の計算を1次までにすれば，この効果を問題にする必要はない．

初め粒子は状態 $|\lambda\rangle$ にあるから，立体角 $(\Omega, \Omega + \mathrm{d}\Omega)$ のなかに1〈粒子〉を放出して状態 $|\alpha\rangle$ に遷移を行なう単位時間あたりの確率，すなわち，上記の立体角方向のベクトルを $\boldsymbol{k}$ とするとき，遷移 $\lambda \to \alpha\boldsymbol{k}$ の単位時間あたりの確率は，

$$w_{\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}}\mathrm{d}\Omega = 2\pi\,|\langle\lambda|H'|\alpha\boldsymbol{k}\rangle|^2\,\rho_L(\omega)\mathrm{d}\Omega \tag{80}$$

によって1次まで与えられる（第17章(50)を参照）．ここで〈粒子〉のエネルギー ω は保存条件

$$\omega = \omega_{\lambda\alpha} \equiv E_\lambda - E_\alpha$$

にしたがう．関係(49)，(69a)，(70)を考慮すれば，(80)から

(7) 第20章，注(18)を参照．

$$w_{\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}} = 2\pi g^2 \frac{|\langle\lambda|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2}{2\omega}\frac{\omega k}{(2\pi)^3} = \frac{g^2 k}{8\pi^2}|\langle\lambda|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2 \tag{81}$$

を得る. 角について積分すれば, λ から α への単位時間あたりの遷移確率が得られる. これを $\Gamma_{\lambda\to\alpha}$ で表わせば,

$$\Gamma_{\lambda\to\alpha} \equiv \int w_{\lambda\to\alpha\boldsymbol{k}}\mathrm{d}\Omega = \frac{g^2 k}{8\pi^2}\int |\langle\lambda|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle|^2\mathrm{d}\Omega. \tag{82}$$

状態 β への遷移に対しても同じような式を得る. 単位時間あたりの全遷移確率 Γ_λ は

$$\Gamma_\lambda = \Gamma_{\lambda\to\alpha} + \Gamma_{\lambda\to\beta} \tag{83}$$

である.

つぎの半古典的な議論にはいくつかの保留を必要とするが, それについては§13 でたちもどることにする. これによれば, Γ_λ は状態 $|\lambda\rangle$ の平均寿命の逆数である. 実際, 粒子の統計的集合を考え, 時刻 t に状態 $|\lambda\rangle$ を占める粒子の個数を $N_\lambda(t)$ で表わせば, 時間間隔 $(t, t+\mathrm{d}t)$ において放射遷移を行なう粒子の個数は $\Gamma_\lambda N_\lambda(t)\mathrm{d}t$ である. したがって,

$$N_\lambda(t+\mathrm{d}t) = (1-\Gamma_\lambda\mathrm{d}t)N_\lambda(t)$$

すなわち

$$\mathrm{d}N_\lambda/\mathrm{d}t = -\Gamma_\lambda N_\lambda,$$

これから

$$N_\lambda(t) = N_\lambda(0)\mathrm{e}^{-\Gamma_\lambda t} \tag{84}$$

を得る. よく知られているように, これは平均寿命 $1/\Gamma_\lambda$ をもった指数的減衰の法則である.

ここで取り扱った例では, 放射遷移が実質上二つの形, すなわち $\lambda\to\alpha$ と $\lambda\to\beta$ の形で起こりうる. 前者の後者に対する分岐比は $\Gamma_{\lambda\to\alpha}/\Gamma_{\lambda\to\beta}$ である.

§11 の数値的なデータと記号を使って, Γ の大きさの程度を定めてみよう. あまり高くない励起エネルギーに対しては $k\approx D$ が成り立ち, 粒子の波動関数のひろがり $\langle R\rangle$ はほぼ $(2MD)^{-1/2}$ であるから,

$$k\langle R\rangle \approx (D/2M)^{1/2} \simeq 5\times10^{-3} \ll 1$$

を得る. それゆえ $\langle\lambda|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle$ を評価するのに, 指数関数のところをテイラー展開して, 0でない寄与をもたらす最初の項だけをとることができる(長波長近似). この項の大きさの程度は角運動量の選択規則によって本質的に決められる. 最もふつうの条件 (双極子遷移) の下では

$$|\langle\lambda|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}|\alpha\rangle| \simeq |\langle\lambda|\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}|\alpha\rangle| \approx k\langle R\rangle,$$

これから

$$\Gamma_{\lambda\to\alpha} \approx (g^2 k/2\pi)(k\langle R\rangle)^2 \approx 10^{-6}D$$

を得る．同じ値を Γ_λ として採用すれば，粒子がそのポテンシャル内で行なう運動を特徴づける時間 $1/D$ にくらべてはるかに大きい（10^6 倍程度の）平均寿命 $1/\Gamma_\lambda$ を得る．それゆえ，われわれがしたように，〈粒子〉の放出に対する相互作用 H' の影響は小さい摂動であるとみなす取り扱いは理に適っている．

Γ_λ を表わすのに，直接（80）から出発し，準位密度の定義，エネルギー保存の条件，完全性関係を使えば，形式的にきわめて簡単な，きわめて一般的な式をつくることができる．すなわち順に

$$\Gamma_\lambda = 2\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_\nu \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\,|\langle\lambda|H'|\nu\boldsymbol{k}\rangle|^2\,\delta(E_\lambda - E_\nu - \omega)$$

$$= 2\pi\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \sum_\nu \int \mathrm{d}\boldsymbol{k}\,\langle\lambda|H'\,\delta(E_\lambda - H_0)|\nu\boldsymbol{k}\rangle\langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle$$

$$= 2\pi\langle\lambda|H'\,\delta(E_\lambda - H_0)H'|\lambda\rangle \tag{85}$$

を得る (8)．この式はのちに有用となる．

§ 13. スペクトル線の幅

上に述べた準安定状態の取り扱いはかなり大まかな近似に基づいている．この近似をもっと精密にし，このような状態の時間的変化をもっと正確に取り扱う方法を述べよう．これによってわれわれは準位のずれとスペクトル線の幅という概念に到達する．

ここでは中間表示を使うのがよい．すでにこれは時間を含む摂動法のところで導入されており，その時間的変化の演算子は

$$U_I(t) \equiv \mathrm{e}^{+\mathrm{i}H_0t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht} \tag{86}$$

である（第17章（10）を参照；$t_0 = 0$ と置く）．U_I の時間的変化はハミルトニアン

$$H'_I(t) \equiv \mathrm{e}^{+\mathrm{i}H_0t}H'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0t} \tag{87}$$

によって支配される．この表示における状態ベクトルを $|\Psi(t)\rangle$ で表わす．仮定により，時刻 $t = 0$ においてこれは $|\lambda\rangle$ に等しい．それゆえ

$$|\Psi(t)\rangle = U_I(t)|\lambda\rangle. \tag{88}$$

このベクトルの $|\lambda\rangle$ 方向の成分を $f(t)$ とし，$|\lambda\rangle$ の補空間への射影を $|\Psi'\rangle$ とする．すなわち

$$f(t) \equiv \langle\lambda|U_I(t)|\lambda\rangle, \qquad |\Psi(t)\rangle = f(t)|\lambda\rangle + |\Psi'(t)\rangle. \tag{89}$$

ところで，指数的減衰の法則を導き出したときの初等的な推論によれば，任意の t に対

(8) (85) はまた，いまの問題に限って現われる式ではない．これは単位時間あたりの遷移確率を摂動計算の第1近似で一般的に表わす式である．実際，これを第17章 §4 の理論から直接に導くこともできる．そのためには第17章 (40) から出発し，この式のなかに現われる関数 f の漸近式 (43) を使えばよい．

して

$$|f(t+\mathrm{d}t)|^2=(1-\Gamma_\lambda \mathrm{d}t)\,|f(t)|^2$$

が成り立つと考えられる．実際には，この結果の基礎となった摂動の計算が正しいのは $f(t)\simeq 1$ のとき，すなわち時間 t が十分小さく，状態ベクトルがほとんど初期値に等しいあいだだけである．t の値がもっと大きくなると，$|\Psi'\rangle$ が重要になり，この存在によって成分 $f(t)$ の変化の法則は変わってくる恐れがある．ハミルトニアン H'_I によって状態 $|\lambda\rangle$ に直接結びつけられる状態の空間，言いかえればただ一つの〈粒子〉を含むベクトル $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ から成る空間を考え，$|\Psi'\rangle$ の代りにこの空間への射影をとっても，その効果の本質的な部分は考慮に入っていることが期待されよう．これから使うのはこの近似法である．これは H'_I の行列要素のうち，遷移

$$\lambda \rightleftarrows (\nu\boldsymbol{k})$$

に対応するものだけを残すことに当たる．これを<u>縮小相互作用近似</u>（approximation du couplage réduit）と名づけよう．

このようにしてハミルトニアン H'_I は，ベクトル $|\lambda\rangle$ と $|\nu\boldsymbol{k}\rangle$ 型のベクトルの全体が張る空間への射影によって置き換えられ，状態ベクトルは変化の過程を通じてこの空間にとどまり，これを

$$|\Psi(t)\rangle=f(t)|\lambda\rangle+\sum_{\nu\boldsymbol{k}}h_{\nu\boldsymbol{k}}(t)|\nu\boldsymbol{k}\rangle \tag{90}$$

と書くことができる．$f(t)$ はこの場合も等式（89）によって定義され，$h_{\nu\boldsymbol{k}}(t)$ は等式

$$h_{\nu\boldsymbol{k}}(t)\equiv\langle\nu\boldsymbol{k}|U_I(t)|\lambda\rangle \tag{91}$$

によって定義される．

縮小相互作用近似によれば，シュレーディンガー方程式を解くことは，一連の求積法に帰着させることができる．

そのためには，シュレーディンガー方程式の積分形式（第17章（13）を参照）

$$U_I(t)=1-\mathrm{i}\int_0^t H'_I(\tau)U_I(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{92}$$

と，これに反復法を施して得られる同値な方程式（第17章（14）を参照）

$$U_I(t)=1-\mathrm{i}\int_0^t H'_I(\tau)\mathrm{d}\tau-\int_0^t \mathrm{d}\tau\int_0^\tau \mathrm{d}\tau'\,H'_I(\tau)H'_I(\tau')U_I(\tau') \tag{93}$$

から出発する．

あとの式から，状態 $|\lambda\rangle$ に関する両辺の平均値をとることにより，$f(t)$ に対する一つの積分方程式が導かれる．事実，H' の性質と定義（87），（89）を考慮に入れ，縮小相互作用近似では

$$\langle\lambda|H'_I(\tau)H'_I(\tau')=\langle\lambda|H'_I(\tau)H'_I(\tau')|\lambda\rangle\langle\lambda$$

が成り立つ (*) ことに注意すれば,

$$f(t)=1-\int_0^t \mathrm{d}\tau \int_0^\tau \mathrm{d}\tau' \langle\lambda|H'_I(\tau)H'_I(\tau')|\lambda\rangle f(\tau') \tag{94}$$

を得る. この式の右辺の積分に変数変換

$$\int_0^t \mathrm{d}\tau \int_0^\tau \mathrm{d}\tau' \cdots = \int_0^t \mathrm{d}\tau' \int_0^{t-\tau'} \mathrm{d}(\tau-\tau')\cdots$$

を施せばいっそう簡単な形になる. また, H'_I をその定義式に置き換えれば,

$$\langle\lambda|H'_I(\tau)H'_I(\tau')|\lambda\rangle = \langle\lambda|H'\exp[\mathrm{i}(E_\lambda-H_0)(\tau-\tau')]H'|\lambda\rangle$$

となる. ここで

$$\xi(t)\equiv\langle\lambda|H'\exp[\mathrm{i}(E_\lambda-H_0)t]H'|\lambda\rangle \tag{95}$$

$$q(t)\equiv\int_0^t \xi(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{96}$$

と置けば, 計算の結果

$$f(t)=1-\int_0^t q(t-\tau)f(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{97}$$

となる.

$f(t)$ がわかれば, 成分 $h_{\nu\boldsymbol{k}}(t)$ は簡単な積分によって得られる. そのためには (92) の両辺の行列要素 ($\lambda\to\nu\boldsymbol{k}$) を等しいと置けばよい. 縮小相互作用近似によれば,

$$\langle\nu\boldsymbol{k}|H'_I(\tau)=\langle\nu\boldsymbol{k}|H'_I(\tau)|\lambda\rangle\langle\lambda| = \exp[\mathrm{i}(\omega+E_\nu-E_\lambda)\tau]\langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle\langle\lambda|$$

と書くことができるから,

$$h_{\nu\boldsymbol{k}}(t)=-\mathrm{i}\langle\nu\boldsymbol{k}|H'|\lambda\rangle\int_0^t \exp[\mathrm{i}(\omega+E_\nu-E_\lambda)\tau]f(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{98}$$

を得る.

こうして問題は積分方程式 (97) を解くことに帰着した.

そのためにはラプラス変換を利用する. $f(t)$, $q(t)$ のラプラス変換をそれぞれ $F(s)$, $Q(s)$ で表わす. すなわち

$$F(s)\equiv\int_0^\infty \mathrm{e}^{-st}f(t)\mathrm{d}t \tag{99}$$

$$Q(s)\equiv\int_0^\infty \mathrm{e}^{-st}q(t)\mathrm{d}t. \tag{100}$$

1の変換は $1/s$ であり, たたみこみは積に変換されるから, 方程式 (97) のラプラス変換によって方程式

(*) [訳注] $\langle\lambda|H'_I|\lambda\rangle=0$, $\langle\nu'\boldsymbol{k}'|H'_I|\nu\boldsymbol{k}\rangle=0$ から $\langle\lambda|H'_I(\tau)H'_I(\tau')|\nu\boldsymbol{k}\rangle=0$. したがって上の式の $\langle\nu\boldsymbol{k}|$ 成分は0である.

$$F(s)=\frac{1}{s}-Q(s)F(s)$$

が得られる．この解は明らかに，

$$F(s)=\frac{1}{s+s\,Q(s)}$$

である．また，(95)，(96)，(100) から

$$s\,Q(s)=\int_0^\infty \mathrm{e}^{-st}\xi(t)\mathrm{d}t=\mathrm{i}\langle\lambda|H'(E_\lambda-H_0+\mathrm{i}s)^{-1}H'|\lambda\rangle,$$

したがって

$$F(s)=\frac{1}{s+\mathrm{i}\langle\lambda|H'(E_\lambda-H_0+\mathrm{i}s)^{-1}H'|\lambda\rangle} \tag{101}$$

を得る．

これからの議論のためには，複素変数の関数

$$W(z)\equiv\langle\lambda|H'\frac{1}{z-H_0}H'|\lambda\rangle \tag{102}$$

$$=\sum_\nu\int\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\mathrm{d}k\,\frac{|\langle\lambda|H'|\nu k\rangle|^2}{z-E_\nu-\omega} \tag{102'}$$

を導入しておくとつごうがよい．(102′) を調べれば容易に確かめられるように，

i) z 平面において実軸上の半直線 $\mathrm{Im}\,z=0$, $\mathrm{Re}\,z\geqslant E_\alpha+\mu$ に沿って切れ目を入れると，残りの部分で $W(z)$ は正則である．

ii) $W(z^*)=W^*(z)$.

iii) $\mathrm{Im}\,W$ は $\mathrm{Im}\,z$ と反対の符号をもつ．

われわれが特に興味をもつのは，上記の切れ目の近くにおける $W(z)$ の挙動であるから，E を実の変数，ε を正の無限小とすれば，

$$\frac{1}{E-H_0\pm\mathrm{i}\varepsilon}=PP\frac{1}{E-H_0}\mp\mathrm{i}\pi\,\delta(E-H_0)$$

であることが知られている．そこで二つの実関数

$$\Delta(E)\equiv\langle\lambda|H'\,PP\frac{1}{E-H_0}H'|\lambda\rangle \tag{103}$$

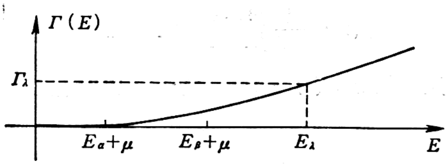
$$\Gamma(E)\equiv2\pi\langle\lambda|H'\,\delta(E-H_0)H'|\lambda\rangle \tag{104}$$

を導入すれば，

$$W(E\pm\mathrm{i}\varepsilon)=\Delta(E)\mp\frac{1}{2}\mathrm{i}\Gamma(E) \tag{105}$$

となる．

関数 Δ と Γ の一般的挙動はこれらの定義から容易に導き出される．$\Gamma(E)$ の挙動は



21・4図　$\Gamma(E)$ の一般的挙動．

21・4 図のとおりである．

$$\Gamma(E)\begin{cases} =0 & (E<E_\alpha+\mu \text{ のとき}) \\ >0 & (E>E_\alpha+\mu \text{ のとき}) \end{cases}$$

に注意する．$E=E_\lambda$ に対しては記号

$$\Delta_\lambda(E)=\delta E_\lambda, \qquad \Gamma(E_\lambda)=\Gamma_\lambda \tag{106}$$

を使う．Γ_λ という量はすでに §12 で導入したものである（式 (85) を参照）．

複素変数 s の関数 $F(s)$ の解析的性質は $W(z)$ の性質から出る．実際 (101) から

$$F(s)=\frac{1}{s+\mathrm{i}W(E_\lambda+\mathrm{i}s)} \tag{107}$$

である．s 平面において虚軸上の半直線

$$\mathrm{Re}\, s=0, \qquad \mathrm{Im}\, s<(E_\lambda-E_\alpha-\mu)$$

に沿って切れ目を入れると，残りの部分で $1/F$ は正則であり (性質 i))，その実部は $\mathrm{Re}\, s$ と同じ符号をもつが絶対値では大きくなっている (性質 iii))．それゆえ，逆数 $F(s)$ はこの切れ目を除いた平面で正則となり (9)，不等式

$$|F(s)|<\frac{1}{|\mathrm{Re}\, s|}$$

を満たす．切れ目の両側でこの関数は式

$$F(-\mathrm{i}x\pm\varepsilon)=\frac{\mathrm{i}}{x-\Delta(E_\lambda+x)\pm(1/2)\mathrm{i}\Gamma(E_\lambda+x)} \tag{108}$$

によって与えられる（x は実，ε は正の無限小）．

ここまでくると，われわれの問題に関する解の一般的挙動がわかり，その物理的内容を議論することもできる．

振幅 $f(t)$ は $F(s)$ から逆ラプラス変換によって得られる．よく知られた反転公式により，

(9) 虚軸上の切れ目より上の部分では，$F(s)$ が極をもつこともありうる．われわれは相互作用が十分弱いと仮定し，このような偶発的事態を除外しておく．

$$f(t)=\frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_{-\mathrm{i}\infty+\varepsilon}^{+\mathrm{i}\infty+\varepsilon}\mathrm{e}^{st}F(s)\mathrm{d}s.$$

積分の道は虚軸に平行な直線で $F(s)$ の特異点をすべて左に見るようにとる．$x=\mathrm{i}s$ と置けば，この式から

$$f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}xt}F(-\mathrm{i}x+\varepsilon)\mathrm{d}x \tag{109}$$

が導かれる．もっと手ごろな式を得るには，この式の変数 $-\mathrm{i}x+\varepsilon$ を $-\mathrm{i}x-\varepsilon$ に置き換えた式をつくって差をとる．実は W の性質 i) を使って容易に確かめられるように，あとの式は恒等的に 0 である．それゆえ，

$$f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}xt}[F(-\mathrm{i}x+\varepsilon)-F(-\mathrm{i}x-\varepsilon)]\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}xt}G(x)\mathrm{d}x, \tag{110}$$

ただし

$$G(x)\equiv\frac{1}{2\pi}\frac{\Gamma(E_\lambda+x)}{[x-\Delta(E_\lambda+x)]^2+\Gamma^2(E_\lambda+x)/4} \tag{111}$$

とする（式 (108) を参照）．Γ と Δ が十分小さいとき，$G(x)$ は点 $x=0$ の近くで鋭く最大値に到達し，積分 (110) において支配的な寄与はこの領域からくる．それを評価するために，緩やかに変動する関数 Γ と Δ を，点 $x=0$ におけるそれらの値に置き換えると，関数 $G(x)$ は

$$G_1(x)\equiv\frac{1}{2\pi}\frac{\Gamma_\lambda}{(x-\delta E_\lambda)^2+\Gamma_\lambda^2/4}$$

に変わることになる(21･5 図を参照) [10]．このとき積分は容易に計算され，

$$f(t)=\exp[-(\mathrm{i}\delta E_\lambda+\Gamma_\lambda/2)t], \tag{112}$$

したがって

$$|f(t)|^2=\mathrm{e}^{-\Gamma_\lambda t}$$

を得る．その結果もう一度指数的減衰の法則が得られる（式 (84) を参照）．

公式 (112) によれば，準位 λ の変化の法則に対して，相互作用の項 H' がもたらす修正は，本質的に複素エネルギー

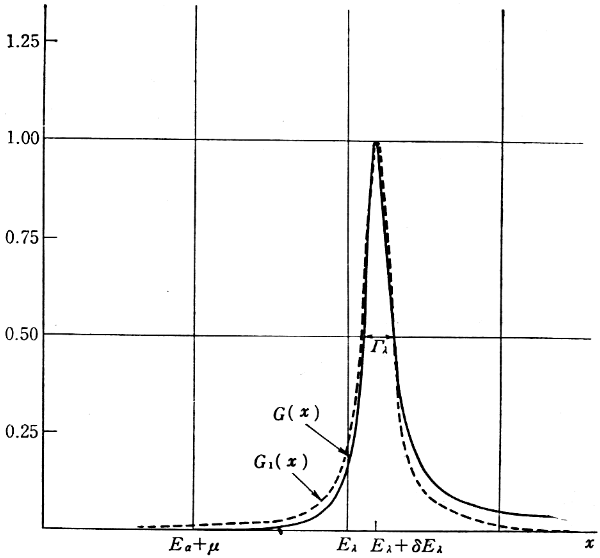
$$\delta E_\lambda-\frac{1}{2}\mathrm{i}\Gamma,$$

---

[10] $f(t)$ に生じる誤差の絶対値は，

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|G(x)-G_1(x)|\mathrm{d}x$$

より小さい．Γ_λ と δE_λ が $E_\lambda-E_\alpha-\mu$ と $E_\lambda-E_\beta-\mu$ にくらべて十分小さいとき，時間の経過がごく長い場合 ($t\gg 1/\Gamma_\lambda$) を除けば，上記の大きさは相対的に無視できる程度である．



21・5図　関数 $G(x)$ と $G_1(x)$ の一般的挙動．関数 Δ と Γ のエネルギーに対する依存性が典型的な双極遷移の場合．すなわち

$$\Delta(E_\lambda + x) \simeq \text{定数} = \delta E_\lambda, \qquad \Gamma(E_\lambda + x)/\Gamma_\lambda = (x+\xi)^3/\xi^3$$

$$(\xi \equiv E_\lambda - E_\alpha - \mu).$$

ここでは $\delta E_\lambda/\xi = 0.2$, $\Gamma_\lambda/\xi = 0.1$ にとってある．

を付け加えることである．実部 δE_λ は本来の意味における準位のずれである．これを表わす式は安定な状態の準位のずれを表わす式に似ている（式 (71), (103), (106) を参照）．虚部は準安定状態に特有のもので，符号を別にすれば準位の幅の半分である．指数的減衰をひき起こすのはこの部分である．

この解釈を正確に述べるために，$t \to \infty$ の極限における系の状態を調べる．この極限において $f(t) \to 0$. (98) と (99) から，あるいはむしろ (98) と (109) から，

$$h_{\nu k}(\infty) = -\mathrm{i}\langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle F(-\mathrm{i}(\omega + E_\nu - E_\lambda) + \varepsilon)$$

が導かれる．(108) を考慮すれば，これから

$$h_{\nu k}(\infty) = \frac{\langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle}{\omega + E_\nu - E_\lambda - \Delta(E_\nu + \omega) + \mathrm{i}\Gamma(E_\nu + \omega)/2}$$

を得る．この絶対値を二乗すれば，状態 $|\nu \boldsymbol{k}\rangle$ に系を見いだす確率が得られ，それはつぎのように書き表わされる：

$$|h_{\nu k}(\infty)|^2 = 2\pi \frac{|\langle \nu \boldsymbol{k} | H' | \lambda \rangle|^2}{\Gamma(E_\nu + \omega)} G(\omega + E_\nu - E_\lambda). \tag{113}$$

この式で $G(x)$ は (111) によって定義された関数である．すでに述べた $G(x)$ の性質 (21·5 図を参照) により，$|h_{\nu k}(\infty)|^2$ が目に立つ値をとるのは，$\omega+E_\nu \simeq E_\lambda$ のとき，すなわち摂動のないエネルギーをおおよそ保存する遷移に対してだけである．このような場合——ここで取り扱っている例では $\nu=\alpha$ または $\nu=\beta$ の場合——に対しては，$G(x)$ を $G_1(x)$ に置き換えることができる．たとえば，遷移 $\lambda\to(\alpha k)$ に対しては公式

$$|h_{\alpha k}(\infty)|^2=\frac{|\langle\alpha k|H'|\lambda\rangle|^2}{(\omega+E_\alpha-E_\lambda-\delta E_\lambda)^2+\Gamma_\lambda^2/4} \tag{114}$$

を得る．この式によると，この遷移において放出される〈粒子〉のエネルギー分布は幅 Γ_λ の《ローレンツ分布》によって与えられ，その中心は $E_\lambda+\delta E_\lambda-E_\alpha$，すなわちこの遷移のボーア振動数をずれ δE_λ だけ修正したところにある．

これらの結果の意味について，いくつかの注意をしておく必要がある．

第一に，法則 (114) のような分布法則を実験上のデータとくらべるためには，初期状態 $|\lambda\rangle$ が実験的にはどのようにしてつくられるかを正確に定めなければならない．この点には §15 でたちもどるであろう．

それはそれとして，さきに述べた取り扱いにはかなり厳しい制限がついている．§11 の数値的データを採用すれば，ずれ δE_λ は δE_α と同じ程度であり，したがって摂動のない準位間距離よりもはるかに大きいことが確かめられる．実際には，質量のくりこみによる効果を $\delta E_\lambda^{(0)}$ で表わすとき，差

$$\delta E'_\lambda\equiv\delta E_\lambda-\delta E_\lambda^{(0)}$$

は準位間距離にくらべて小さい補正であることが示される．ここに現われた困難は §11 で長々と論じた困難とまったく同じものである．問題の議論はここでも一つ一つ繰り返すことができる．

第三に——そしてこれは明らかに縮小相互作用近似に関連しているが——他の準位のずれがまったく考慮されていない．特に，準位 α および β への遷移が取り扱われているのに，α と β のずれが考慮されていない．

これら二つの効果を考慮に入れて公式 (114) を修正することもできる．ハミルトニアン $H_{\text{part.}}$ のなかの M に質量の実験値を代入して得られる準位を $E_\alpha^{(0)},\cdots,E_\lambda^{(0)},\cdots$ で表わせば，修正された公式は

$$|h_{\alpha k}(\infty)|^2_{\text{corr.}}=\frac{|\langle\alpha k|H'|\lambda\rangle|^2}{(\omega+E_\alpha^{(0)}+\delta E'_\alpha-E_\lambda^{(0)}-\delta E'_\lambda)^2+\Gamma_\lambda^2/4} \tag{114'}$$

と書かれる．普通，実験上のデータと対照されるのはこの種の公式である．そして非常に良い一致が見られる．

§14. 弾性散乱．分散式

終りに当たって簡単な衝突の問題をいくつか考えよう．

第一の問題として，基底状態にある粒子による場の〈粒子〉の弾性散乱を取り扱う．入射〈粒子〉の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}_i$ で表わし，衝突後に〈粒子〉が観測される方向を向いた同じ長さのベクトルを $\boldsymbol{k}_f$ とする．すなわち遷移

$$i \longrightarrow f \equiv (\alpha\, \boldsymbol{k}_i) \longrightarrow (\alpha\, \boldsymbol{k}_f)$$

を取り扱う．そのために

$$k_i = k_f = k, \qquad \omega_i = \omega_f = \omega$$

と置き，系の初期エネルギーを E で表わす．すなわち

$$E = \omega + E_\alpha. \tag{115}$$

断面積は一般公式

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{2\pi}{\text{入射流束}} |T_{i\to f}|^2 \rho_f(E) \tag{116}$$

によって与えられる．$T_{i\to f}$ は遷移振幅である．すなわち

$$T_{i\to f} \equiv \langle f | T | i \rangle \equiv \langle \alpha\, \boldsymbol{k}_f | T | \alpha\, \boldsymbol{k}_i \rangle \tag{117}$$

$$T = H' + H' \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\varepsilon} H' \tag{118}$$

である．入射流束は入射速度 k/ω と状態 $|\alpha \boldsymbol{k}_f\rangle$ にある〈粒子〉の密度との積に等しく，ここで採用する規格化によれば $L^{-3}k/\omega$ となる．$\rho_f(E)$ はエネルギー E をもつ終状態の密度である（式（49）を参照）．それゆえ，

$$2\pi\, \rho_f(E)/(\text{入射流束}) = L^6\, \omega^2/4\pi^2,$$

したがって

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{L^6\, \omega^2}{4\pi^2}\right) |T_{i\to f}|^2 \tag{119}$$

が成り立つ．

これまでのところは，衝突の理論の基本的な公式がここでもまったく正しいと考えてきた．われわれの出発点である式（116）と（118）はその本質において，それぞれ第19章の（115）と（143）に同値である．いくつかの違いはただ記号，単位の選び方，遷移振幅の定義に現われる波動関数の規格化によるものだけである．

しかし今の場合，これらの式は絶対的に正確なものではない．すなわち，衝突の前および後における系の変化はハミルトニアン H_0 によって実質的に支配され，相互作用 H' は完全に無視できるという仮定の下にこれらの式はつくられている．このような仮定は，第10章と第19章の衝突問題ではまったく正しいけれども，ここでは正しくなくなる．

たとえば，衝突前の系の状態を調べよう．粒子は基底状態にあり，場の〈粒子〉は粒子に向かう波束で表わされる．粒子は原点をとりまく小さな領域のなかで運動し，波束はまだこの領域に達していない．それゆえ〈粒子〉－粒子相互作用は無視され，〈粒子〉は自由粒子のように変化する．ここまでは，いまの状況も普通の衝突理論の場合と変わらない．しかし，それでも相互作用 H' を無視することはできない．なぜなら，この粒子は入射〈粒子〉とは切り離されていても，場とはつねに相互作用するからである．厳密に言えば，粒子の初期状態はエネルギー E_α に対するハミルトニアン H_0 の固有状態 $|\alpha\rangle$ ではなく，ハミルトニアン H の固有状態で，$g\to 0$ の極限において $|\alpha\rangle$ に一致するようなもの $|\bar{\alpha}\rangle$ である．この $|\bar{\alpha}\rangle$ の固有エネルギー $E_\alpha+\delta E_\alpha$ は §11 で計算されたものである．

理論を正確にするためには，《物理的状態》$|\bar{\alpha}\rangle$ と摂動のない状態 $|\alpha\rangle$ のあいだにある違いを考慮しなければならない．実際上は，相互作用が十分小さいとき，この違いは本質的に粒子の質量のくりこみ効果として現われ，本来の意味の衝突の機構はこれによって影響を受けない (11)．

このような条件の下に，摂動のないハミルトニアンの定義における実験質量 $M+\delta M$ を質量 M の代りにとれば，衝突の理論にある普通の公式が実質的に成り立つ．

H' を摂動として取り扱うことにより，上記の断面積を計算してみよう．そのため T のところにそのボルン展開を代入する (第19章 (143) を参照)．1次の項をとれば，振幅は明らかに0である．すなわち

$$\langle\alpha\,\boldsymbol{k}_f|H'|\alpha\,\boldsymbol{k}_i\rangle=0.$$

それゆえ2次まで進める必要がある．H' に関する2次の振幅を $T^{(\mathrm{B})}_{i\to f}$ で表わせば，

$$T^{(\mathrm{B})}_{i\to f}\equiv\langle\alpha\,\boldsymbol{k}_f|H'\frac{1}{E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon}H'|\alpha\,\boldsymbol{k}_i\rangle \tag{120}$$

$$=\sum_n\langle\alpha\,\boldsymbol{k}_f|H'|n\rangle\frac{1}{E-E_n+\mathrm{i}\varepsilon}\langle n|H'|\alpha\,\boldsymbol{k}_i\rangle. \tag{120$'$}$$

上の第2行における和は，ハミルトニアン H_0 の基底ベクトル $|n\rangle$ の全体にわたるのであるが，実際には H' がきわめて特殊な形であるため，大部分の項は0になる．0と異なる寄与をもたらす仮想状態はつぎの二つの型に整理される：

i) 〈粒子〉のない状態 $|\nu\rangle$.

ii) それぞれ運動量 $\boldsymbol{k}_i$, $\boldsymbol{k}_f$ をもつ二つの〈粒子〉を含む状態 $|\nu\,\boldsymbol{k}_i\,\boldsymbol{k}_f\rangle$.

(11) 第2近似では，粒子のまわりに多くの〈粒子〉がたまたま存在することによって入射〈粒子〉と粒子のあいだの相互作用にもたらされる修正を考慮しなければならない．この修正は相互作用定数の修正によって本質的に表わされる (《荷電くりこみ》)．

第一の型は遷移

$$(\alpha\, \boldsymbol{k}_i) \longrightarrow (\nu) \longrightarrow (\alpha\, \boldsymbol{k}_f)$$

に対応し，この過程で粒子は入射〈粒子〉を吸収したのち，終状態の〈粒子〉を放出する．第二の型は遷移

$$(\alpha\, \boldsymbol{k}_i) \longrightarrow (\nu\, \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f) \longrightarrow (\alpha\, \boldsymbol{k}_f)$$

に対応し，この過程では初めの〈粒子〉が吸収される前に終りの〈粒子〉が放出される．

ボーア振動数

$$\omega_{\nu\alpha} = E_\nu - E_\alpha \qquad (>0) \tag{121}$$

を導入すれば，つぎの式を得る：

$$T^{(\mathrm{B})}_{i\to f} = \sum_\nu \left[\frac{\langle \alpha\, \boldsymbol{k}_f | H' | \nu \rangle \langle \nu | H' | \alpha\, \boldsymbol{k}_i \rangle}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \frac{\langle \alpha\, \boldsymbol{k}_f | H' | \nu\, \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f \rangle \langle \nu\, \boldsymbol{k}_i \boldsymbol{k}_f | H' | \alpha\, \boldsymbol{k}_i \rangle}{\omega + \omega_{\nu\alpha}} \right]. \tag{122}$$

この式に (69) と (70) を適用し，$C(k)=1$ ($k \ll M$ のときこれは確かに正当である) とすれば，つぎの式を得る：

$$T^{(\mathrm{B})}_{i\to f} = \frac{L^{-3} g^2}{2\omega} \sum_\nu \left[\frac{X_\nu}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \frac{X'_\nu}{\omega + \omega_{\nu\alpha}} \right], \tag{123}$$

ただし，

$$X_\nu \equiv \langle \alpha | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_f \cdot \boldsymbol{R}} | \nu \rangle \langle \nu | \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{R}} | \alpha \rangle \tag{124}$$

$$X'_\nu \equiv \langle \alpha | \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{R}} | \nu \rangle \langle \nu | \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_f \cdot \boldsymbol{R}} | \alpha \rangle. \tag{124'}$$

この式を (119) の右辺に代入すれば，ボルン近似による 2 次の断面積として，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^{(\mathrm{B})}_{i\to f}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{g^4}{16\pi^2} \left| \sum_\nu \left(\frac{X_\nu}{\omega - \omega_{\nu\alpha}} - \frac{X'_\nu}{\omega + \omega_{\nu\alpha}} \right) \right|^2 \tag{125}$$

を得る．

この級数の各項は，上に述べた遷移の一つ一つによる寄与を表わす．すべての事情が同じならば，この遷移に介入する仮想的な状態のエネルギーに対して，入射エネルギーが近いほど，この遷移の寄与は大きくなる．これら二つのエネルギーが等しいとき，この項は無限大である．それゆえ，第一型に属する遷移のうち，ボーア振動数が〈粒子〉の質量を越えるものに対して，すなわち，基底状態への遷移に当たって場の〈粒子〉を放出しうるような各準位に対して，エネルギーの臨界値が一つずつ存在する．

これらの臨界値の一つ，たとえば $E_\lambda (\omega_{\lambda\alpha} > \mu)$ を通過するとき，分母 $\omega - \omega_{\lambda\alpha}$ は 0 になってから符号を変え，項 $X_\lambda/(\omega - \omega_{\lambda\alpha})$ は限りなく増加するため，われわれが断面積を表わした式は発散する．相互作用の定数がどんなに小さくても，この領域では明らかにボ

ルン近似がまったく成り立たなくなる [12]．実際には，断面積は有限な範囲にとどまるけれども，通過の際きわめて鋭い極値を示す．あとでわかるように，これは共鳴の現象であり，第10章（§14—§16）で学んだ現象とまったく同様のものである．

§15. 共鳴散乱．準安定状態の形成

臨界エネルギーの一つ，たとえば E_λ の近くで弾性散乱の断面積を計算するために，遷移振幅を厳密に表わす新しい式を考える．定義（117）と（118）により，

$$\langle f|T|i\rangle = \sum_{nn'}\langle f|H'|n\rangle\langle n|\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}|n'\rangle\langle n'|H|i\rangle. \tag{126}$$

ボルン近似とは，この展開の各項にある厳密なグリーン関数 $(E-H+\mathrm{i}\varepsilon)^{-1}$ の代りに，摂動のないハミルトニアンのグリーン関数 $(E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon)^{-1}$ を入れることに相当する（式（120）と（120′）を参照）．相互作用の定数が十分小さいときには，すべての項に対してこの近似は正しく，例外は $n=\lambda,\ n'=\lambda$ の項だけである．この項については，エネルギーが E_λ という値を通過するとき因数 $\langle\lambda|(E-H_0+\mathrm{i}\varepsilon)^{-1}|\lambda\rangle$ が限りなく大きくなる．この項を $A^{(\mathrm{res.})}$ で表わし，残りを $A^{(\mathrm{pot.})}$ で表わそう．すなわち，

$$A^{(\mathrm{res.})} \equiv \langle f|H'|\lambda\rangle\langle\lambda|\frac{1}{E-H+\mathrm{i}\varepsilon}|\lambda\rangle\langle\lambda|H'|i\rangle \tag{127}$$

$$\langle f|T|i\rangle \equiv A^{(\mathrm{res.})} + A^{(\mathrm{pot.})}. \tag{128}$$

$A^{(\mathrm{pot.})}$ の計算にはボルン近似を使う．計算の結果得られる式は（123）とほとんど同じであり，状態 ν に関する和のなかに $X_\lambda/(\omega-\omega_{\lambda\alpha})$ の項が現われないだけである．残されたのは $A^{(\mathrm{res.})}$ の計算である．

複素変数の関数

$$\Lambda(z) \equiv \langle\lambda|\frac{1}{z-H}|\lambda\rangle \tag{129}$$

を導入する．定義(127)から，H' の行列要素を具体的な式に置き換えて(式(69)と(124)を参照)，

---

[12] 長波長の近似 $(k\langle R\rangle \ll 1)$ では，$|X_\lambda| \simeq (k\langle R\rangle)^2$ が成り立つ．$\Delta\omega = |E-E_\lambda|$ と置き，（125）において支配的な項だけをとれば，

$$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega \simeq (g^4/16\pi^2)(k^2\langle R\rangle^2/\Delta\omega)^2.$$

よく知られた判定法（第19章，§7）により，全断面積が幾何学的断面積 $4\pi\langle R\rangle^2$ の程度になると，ボルン近似は適用できなくなる．それゆえこの事態は

$$\Delta\omega \lesssim (g^2k/4\pi)(k\langle R\rangle)$$

のときに起こる．§11の数値的なデータを使えば，この範囲はごく狭く，$10^{-4}D$ の程度である（しかし幅 Γ_λ よりはるかに大きい）．

$$A^{(\mathrm{res.})} = L^{-3} g^2 \frac{X_\lambda}{2\omega} \Lambda(E + \mathrm{i}\varepsilon) \tag{130}$$

が導かれる．関数 $\Lambda(E+\mathrm{i}\varepsilon)$ を別にすれば，この式に現われた量はいずれも既知のものかまたは容易に計算できるものであって，考えている範囲をエネルギーが動くとき，その関数として緩やかに変わる．

ところで，よく知られた展開により，

$$\begin{aligned}\Lambda(z) &\equiv \langle\lambda|\frac{1}{z-H_0-H'}|\lambda\rangle \\ &= \langle\lambda|\Big(\frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H_0} + \cdots\Big)|\lambda\rangle\end{aligned}$$

が成り立つ．特異点 $z=E_\lambda$ の近くで，各項の寄与の本質的な部分は，H' の行列要素のうち状態 $|\lambda\rangle$ を含むもの，言いかえれば遷移

$$\lambda \rightleftarrows (\nu \boldsymbol{k})$$

に対応する要素によってもたらされる．この注意から，$\Lambda(z)$ を表わす式においてこれらの行列要素の寄与だけを残すことが考えられる．これはすでに §13 で使った縮小相互作用近似である．

こうすれば $\Lambda(z)$ の計算を最後までやりとげることができる．これはまた §13 における $f(t)$ の計算と本質的に同値であり，同じような筋道を通って行なわれる [13]．まず

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H_0} + \frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H} \tag{131}$$

が成り立つ．

状態 $|\lambda\rangle$ に関する両辺の平均値をとれば，$\Lambda(z)$ に対する一つの代数方程式が導かれる．実際，H' の性質を考慮に入れ，縮小相互作用近似では

---

[13] 時間的変化の演算子 $U(t)\equiv\exp(-\mathrm{i}Ht)$ とレゾルベント $(z-H)^{-1}$ はつぎの変換公式によって互いに結びつけられる：

$$(z-H)^{-1} = -\mathrm{i}\int_0^{\eta\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(z-H)t}\,\mathrm{d}t, \qquad U(t) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_C \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}zt}}{z-H}\,\mathrm{d}z$$

[η は $\mathrm{Im}\, z$ の符号；C は $+\infty+\mathrm{i}\varepsilon$ から $+\infty-\mathrm{i}\varepsilon$ までレゾルベントの特異点すなわち H のスペクトルに属する固有値をすべて左に見ながら走る複素平面の曲線]．これらの等式のうちの初めの方と，定義 (86)，(89)，(99)，(129) を使えば容易に

$$F(s) = \mathrm{i}\Lambda(E_\lambda + \mathrm{i}s)$$

が導かれる．F と Λ から縮小相互作用近似によって得られた式 (107) と (133) をそれぞれ F，Λ の代りに使っても，この関係は明らかに成り立つ．

$$\langle\nu|\frac{1}{z-H_0}H'\frac{1}{z-H_0}H'=\frac{1}{z-E_\lambda}W(z)\langle\nu|$$

($W(z)$ は (102) で定義された関数)

であることに注意すれば,

$$\Lambda(z)=\frac{1}{z-E_\lambda}(1+W(z)\Lambda(z)) \tag{132}$$

を得る. これから

$$\Lambda(z)=\frac{1}{z-E_\lambda-W(z)}. \tag{133}$$

この式を (130) に代入すれば,

$$A^{(\mathrm{res.})}=(L^{-3}g^2/2\omega)\frac{X_\lambda}{E-E_\lambda-W(E+\mathrm{i}\varepsilon)}.$$

この式がボルン近似による式と異なる点は, 分母のなかに複素量のエネルギー $W(E+\mathrm{i}\varepsilon)$ が現われることだけである. この項の効果によって特異性が消える. $W(E+\mathrm{i}\varepsilon)$ の性質は §13 で調べた. この項の実部と虚部を分離し, 虚部を $E=E_\lambda$ における値に置き換えても (式 (103)−(106) を参照), 弱い相互作用の仮定の下では十分に正しい. エネルギーが変わるときの虚部の変動は無視できるからである. こうすれば $A^{(\mathrm{res.})}$ に対して共鳴散乱振幅に特有な式

$$A^{(\mathrm{res.})}\simeq(L^{-3}g^2/2\omega)\frac{X_\lambda}{E-E_\lambda-\delta E_\lambda+\mathrm{i}\Gamma_\lambda/2} \tag{134}$$

を得る. この中心は $E_\lambda+\delta E_\lambda$, 幅は Γ_λ である.

共鳴散乱に関する第10章の議論, 共鳴散乱と準安定状態の形成とのあいだに存在する結びつきについて述べた同じ章の議論は, 本質的な筋道を変えずに, ここでも繰り返すことができる. 模型を精密にしたため, 散乱振幅, 微分および全断面積, 散乱波の透過における《遅れ》に対して第10章§15で与えられた表示式と ($A^{(\mathrm{pot.})}$ を無視すれば) 実際上同じ式がまた容易に得られる (問題4を参照). この場合の共鳴は平均寿命 $1/\Gamma_\lambda$ をもつ準安定状態 $|\lambda\rangle$ に結びつけられる. その性質についてはすでに §12 と 13 で論じた.

断面積の精密な測定を行なうためには, 特にエネルギーの関数としてその変化の特徴を明らかにするためには, 入射〈粒子〉のエネルギーにおける散らばり $\Delta\omega$ が十分小さく, 散乱振幅が区間 $\Delta\omega$ で実際上定数となるようにしなければならない. 共鳴の領域では, このことは

$$\Delta\omega\ll\Gamma_\lambda$$

を意味する. 衝突が続いている時間 $1/\Delta\omega$ はこの場合寿命 $1/\Gamma_\lambda$ よりはるかに大きく, 寿

命は観測不可能である.

逆に，これと相補的な実験的条件，すなわち

$$\Delta\omega \gg \Gamma_\lambda$$

の下では，現象の時間的展開を観測し，$1/\Delta\omega$ 程度の過渡期がすぎたのち，準安定状態 $|\lambda\rangle$ に特有の減衰法則を明らかにすることができる．この結果は共鳴の領域における散乱振幅のきわめて特殊な形（式 (134)）から生じるものであり，第10章 §16 の計算をそのまま繰り返すことによって容易に得られる.

§ 16. 〈粒子〉の吸収（光電効果）．放射性捕獲

これまでに取り扱った問題には，粒子の束縛状態しか入ってこなかった．この §16 では非束縛状態の存在を前提とする二つの問題，〈粒子〉の吸収と放射性捕獲を取り扱う．具体的に考えるため，$\lim_{R\to\infty} V(R) = 0$ であると仮定し，その結果として粒子のスペクトルは，負のエネルギー $E_\alpha, E_\beta, \cdots, E_\lambda, \cdots$ をもつ束縛状態のとびとびの列と，0 から $+\infty$ までひろがったエネルギーをもつ非束縛状態の連続部分から成るとする．第19章 §2 の定義にしたがって，波数ベクトル $\boldsymbol{q}$ に結びついた定常波を $\phi_{\boldsymbol{q}}^{(+)}$ および $\phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}$ とする．これらは定義により，エネルギー

$$E = q^2/2M \tag{135}$$

に対応する $H_{\text{part.}}$ の固有解である．相互作用の項 H' を無視するときには，これらはまた H_0 の固有解とも考えられ，この場合は系全体の衝突の定常状態を表わす．相互作用を考慮に入れるとき，対応する衝突の定常状態を $\Psi_{\boldsymbol{q}}^{(+)}$ と $\Psi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}$ で表わそう.

ここで，基底状態にある粒子が速度 $\boldsymbol{k}/\omega$ をもつ〈粒子〉の等速ビームを受けているとする．入射〈粒子〉のエネルギー ω が《原子をイオン化する》のに十分であるとき，すなわち

$$\omega > (-E_\alpha)$$

であるとき，〈粒子〉はそのエネルギーの全体を粒子に移すことによって単純に吸収されることが起こりうる．このとき粒子は運動エネルギー E をもって放出され，このエネルギーは受け取ったエネルギー ω と束縛エネルギー $(-E_\alpha)$ との差に等しい．すなわち

$$E = \omega + E_\alpha.$$

これによって光電効果（第1章，§4）の機構がもう一度見なおされる.

エネルギー $\boldsymbol{k}$ の〈粒子〉を吸収し，定方向に粒子を放出する散乱の断面積を計算してみよう．$\boldsymbol{q}$ で表わされるベクトルは上記の定方向を向き，その長さは (135) によってエネルギー E と関係づけられているとする．このとき問題になっている遷移は

$$i \to f \equiv (\alpha \boldsymbol{k}) \to (\boldsymbol{q})$$

である．弾性散乱の場合のように，普通の衝突理論の諸公式が適用されるということを，議論なしに認めておく［しかし，この点につき§14で述べたいくつかの保留条件はここでも適用される］．それゆえ，断面積は公式（116）によって与えられる．ただし，入射流束に対しては同じ式を使うが，$\rho_f(E) = Mq/(2\pi)^3$ であり，遷移振幅を表わす式は

$$T_{i\to f} \equiv \langle \boldsymbol{q} | T | \alpha \boldsymbol{k} \rangle = \langle \Psi_{\boldsymbol{q}}^{(-)} | H' | \alpha \boldsymbol{k} \rangle$$

である（第19章（122）を参照）．

H' に関する最低次の項で打ち切るならば，$\Psi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}$ を $\phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)}$ に置き換えてこの行列要素を計算することができる（第19章（129），（130）を参照）．その結果，

$$T_{i\to f} \simeq \langle \phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)} | H' | \alpha \boldsymbol{k} \rangle = (L^{-3} g^2/2\omega)^{1/2} \langle \phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)} | \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} | \alpha \rangle,$$

したがって

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\alpha \boldsymbol{k} \to \boldsymbol{q})}{\mathrm{d}\Omega} \simeq \frac{g^2}{8\pi^2} \frac{Mq}{k} |\langle \phi_{\boldsymbol{q}}^{(-)} | \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} | \alpha \rangle|^2. \tag{136}$$

逆の反応に関する断面積も同じように計算される．この場合，初めに運動量 $\boldsymbol{q}$ をもって伝播する粒子がポテンシャル $V(R)$ によって状態 α のなかに捕獲され，同時に運動量 $\boldsymbol{k}$ をもつ〈粒子〉が放出される．すなわち，

$$\boldsymbol{q} \longrightarrow \alpha \boldsymbol{k}.$$

H' に関する第1近似では，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\boldsymbol{q} \to \alpha \boldsymbol{k})}{\mathrm{d}\Omega} \simeq \frac{g^2}{8\pi^2} \frac{Mk}{q} |\langle \alpha | \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} | \phi_{\boldsymbol{q}}^{(+)} \rangle|^2. \tag{137}$$

この式は直接にも得られるが，時間反転によって互いに導かれる二つの反応 $\boldsymbol{q} \to \alpha \boldsymbol{k}$ と $(K\alpha)(-\boldsymbol{k}) \to (-\boldsymbol{q})$ に微視的可逆性関係（第19章（190））を適用することにより，前の式からも導き出される．実際，

$$\langle \alpha | \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} | \phi_{\boldsymbol{q}}^{(+)} \rangle = \langle \phi_{-\boldsymbol{q}}^{(-)} | \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} (K | \alpha \rangle)$$

が成り立つからである．

III. 電磁輻射の古典理論

§17. マクスウェル＝ローレンツの古典理論における方程式

輻射に関する古典理論はマクスウェル方程式 [14]

---

(14) スカラー場を取り扱ってきたときとは逆に，ここでは有理化された単位系を使わない．その結果，（139）の右辺に因数 4π が現われる．

$$\mathrm{rot}\,\mathcal{E} + \partial\mathcal{H}/\partial t = 0 \tag{138a}$$

$$\mathrm{div}\,\mathcal{H} = 0 \tag{138b}$$

$$\mathrm{rot}\,\mathcal{H} - \partial\mathcal{E}/\partial t = 4\pi\,\boldsymbol{s} \tag{139a}$$

$$\mathrm{div}\,\mathcal{E} = 4\pi\,s^0 \tag{139b}$$

に基づく．密度 s^0 の電荷分布と密度 $\boldsymbol{s}$ の電流密度があるとき，電場 $\mathcal{E}$ と磁場 $\mathcal{H}$ の変化はこれらの方程式によって定められる．$\boldsymbol{s}$ と s^0 は連続の方程式

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{s} + \partial s^0/\partial t = 0$$

を満たす．これは方程式 (139) からすぐにわかる結果であり，これから電荷保存則が導かれる．

マクスウェル方程式を補うのはローレンツの方程式である．電磁場があるときの電荷の運動はこれによって定められる．この方程式によれば，電荷をもつ流体の慣性力の密度は，各瞬間において電磁力の密度

$$\boldsymbol{f} \equiv s^0\mathcal{E} + (\boldsymbol{s} \times \mathcal{H}) \tag{140}$$

と釣りあう．ローレンツの古典電子論によれば，物質は粒子だけによってつくられ，各粒子は決まった質量と電荷をもつと考えられる．各粒子の運動方程式を得るには，電荷が無限小体積に集中しているときのローレンツ方程式の極限をとればよい．特に，質量 m と電荷 e をもつ粒子を考え，その位置，速度，〔狭義の〕運動量をそれぞれ $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{V}$, $\boldsymbol{\Pi}$ で表わそう ($\boldsymbol{\Pi} = M\boldsymbol{V}$; M は第 20 章の定義 (20) による相対論的質量)．密度 s^0 と $\boldsymbol{s}$——もっと正確に言えばこれらの量に対する上に述べた粒子の寄与——は関係

$$s^0 = e\,\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}), \qquad \boldsymbol{s} = e\,\boldsymbol{V}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}) \tag{141}$$

によって与えられる．この粒子を支配する電磁力 $\boldsymbol{F}$ を得るには，$\boldsymbol{R}$ を囲む小さな領域で $\boldsymbol{f}$ を積分すればよい．ローレンツの方程式により，

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\Pi}/\mathrm{d}t = \boldsymbol{F} \equiv e(\mathcal{E} + \boldsymbol{V} \times \mathcal{H}) \tag{142}$$

が得られる (第 20 章 (22) を参照)．この方程式のなかの $\mathcal{E}$ と $\mathcal{H}$ は，点 $\boldsymbol{R}$ において電場と磁場がとる値を表わす．

$$\boldsymbol{V} \equiv \mathrm{d}\boldsymbol{R}/\mathrm{d}t = \boldsymbol{\Pi}/M \equiv \boldsymbol{\Pi}/\sqrt{m^2 + \Pi^2} \tag{143}$$

[M は粒子の相対論的質量；第 20 章の方程式 (20) を参照] を思い出そう．方程式 (142) と (143) は，場があるときの粒子の運動方程式である．

上に述べた定義と方程式はすべて共変形式に書きかえられる．$\mathcal{E}$ と $\mathcal{H}$ は第 20 章の定義 (9) により反対称テンソル $F_{\mu\nu}$ をつくる．s^0 と $\boldsymbol{s}$ は流れの密度の 4 元ベクトル $s^\mu \equiv (s^0, \boldsymbol{s})$ をつくる．マクスウェル＝ローレンツの方程式は

$$\varepsilon^{\kappa\lambda\mu\nu}\partial_\lambda F_{\mu\nu} = 0 \tag{138'}$$

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = 4\pi s^\nu \tag{139'}$$

と書き表わされ [15]，連続の方程式は $\partial_\nu s^\nu = 0$ となる．力の密度 $\boldsymbol{f}$ は4元ベクトル

$$f^\mu \equiv F^{\mu\nu} s_\nu \tag{140'}$$

の空間部分である．同様に，$\boldsymbol{F}\mathrm{d}t$ は4元ベクトル $eF^{\mu\nu}\mathrm{d}x_\nu$ の空間部分である．$\boldsymbol{\Pi}$ は第20章 §4で定義された4元ベクトル $\Pi^\mu \equiv (M, \boldsymbol{\Pi})$ の空間部分であり，方程式 (142) と M に関する同様な方程式を合わせたものは，粒子の固有時間と4元速度を導入すれば共変形式に書き表わされる．

§18. 古典理論における対称性と保存法則

古典理論の相対論的不変性からいくつかの対称性と保存法則が出てくる．われわれはエネルギーと運動量の保存をいくらか詳しく検討したのちに，角運動量の保存法則や空間および時間反転による対称性を手短かに述べよう．説明を簡潔にするため，系はただ一つの粒子（電子）から成るとする．多粒子系へ一般化することもやさしい．

運動量とエネルギーの保存法則に到達するために，まず，$F^{\mu\nu}$ がマクスウェル＝ローレンツの方程式にしたがうとき，(140′) で定義される量 f^μ はあるテンソルの発散に等しいことを示す．

実際，(139′) により，

$$f^\mu \equiv F^{\mu\nu} s_\nu = \frac{1}{4\pi} F^{\mu\nu}(\partial^\rho F_{\rho\nu}) = \frac{1}{4\pi}[\partial^\rho(F^{\mu\nu}F_{\rho\nu}) - F_{\rho\nu}(\partial^\rho F^{\mu\nu})] \tag{144}$$

が導かれる．一方，F が反対称テンソルであることを考慮すれば，(138′) から

$$\begin{aligned} F_{\rho\nu}(\partial^\rho F^{\mu\nu}) &= \frac{1}{2} F_{\rho\nu}(\partial^\rho F^{\mu\nu} + \partial^\nu F^{\rho\mu}) = \frac{1}{2} F_{\rho\nu}(\partial^\mu F^{\rho\nu}) \\ &= \frac{1}{4}\partial^\mu(F_{\rho\nu}F^{\rho\nu}) = \frac{1}{4} g^{\mu\rho}\partial_\rho(F_{\kappa\lambda}F^{\kappa\lambda}) \end{aligned}$$

を得る．この式を (144) の右辺に代入し，

$$T^{\mu\rho} \equiv \frac{1}{4\pi}\left(F^{\mu\nu}F_\nu^{\ \rho} - \frac{1}{4} g^{\mu\rho} F_{\kappa\lambda}F^{\kappa\lambda}\right) \tag{145}$$

と置けば，

$$f^\mu = \partial_\rho T^{\mu\rho}. \tag{146}$$

これが初めに述べた結果である．

---

(15) 電磁テンソルの双対 $\hat{F}^{\kappa\lambda} = \varepsilon^{\kappa\lambda\mu\nu}F_{\mu\nu}/2$ を導入すれば，方程式 (138′) はさらに簡単なつぎの形に書き表わされる：

$$\partial_\lambda \hat{F}^{\kappa\lambda} = 0.$$

$T^{\mu\rho}$ は《エネルギー－運動量》テンソルである．定義式に含まれる場の成分によって具体的に書けば，つぎのようになる：

$$T^{00} = -\frac{1}{8\pi}(\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2), \qquad T^{k0} = T^{0k} = -\frac{1}{4\pi}(\mathcal{E} \times \mathcal{H})_k,$$

$$T^{kl} = T^{lk} = \frac{1}{4\pi}\left(\mathcal{E}_k\mathcal{E}_l + \mathcal{H}_k\mathcal{H}_l + \frac{1}{2}\delta_{kl}(\mathcal{H}^2 - \mathcal{E}^2)\right).$$

場のエネルギー W^0 と運動量 $\boldsymbol{W}$ を空間全体におけるつぎの積分によって定義する：

$$W^0 \equiv \frac{1}{8\pi}\int(\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{147a}$$

$$\boldsymbol{W} \equiv \frac{1}{4\pi}\int(\mathcal{E} \times \mathcal{H})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{147b}$$

すなわち

$$W^\mu = -\int T^{\mu 0}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{148}$$

W_μ が4元ベクトルであることは本来明らかとは言えない．しかし確かにそうであることは，運動量とエネルギーの保存法則を使って示される．

この法則を証明するために，粒子の運動方程式を

$$\frac{\mathrm{d}\Pi^\mu}{\mathrm{d}t} = \int f^\mu\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

の形に書き表わす．粒子が存在する点を含む限り，積分の範囲をどのような領域 V にとっても，この方程式は成り立つ．f^μ に (146) を代入すれば，

$$\frac{\mathrm{d}\Pi^\mu}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\int_V T^{\mu 0}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right) + \int_V\left(\sum_k \frac{\partial T^{\mu k}}{\partial x^k}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

となる．第二の積分を領域 V の表面における面積分に変形するのは容易である．こうしてから領域 V を全空間にひろげる．電磁場は無限遠において十分速く0になるという仮定はこの場合確かに妥当であり，この仮定の下で面積分は0に近づく．定義 (148) を考慮すれば，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Pi^\mu + W^\mu) = 0$$

を得る．これによって，上に採用した場のエネルギーと運動量の定義が正当化され，系全体（粒子＋場）に関するエネルギーと運動量の保存法則

$$M + W^0 = \text{時間に関する定数} \tag{149a}$$

$$\boldsymbol{\Pi} + \boldsymbol{W} = \text{時間に関する定数} \tag{149b}$$

が与えられる．

同じような議論で，全角運動量の保存法則

$$(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{\Pi})+\boldsymbol{I}=\text{時間に関する定数} \tag{150}$$

が得られる．この場合，場の角運動量 $\boldsymbol{I}$ をつぎのように定義する：

$$\boldsymbol{I}\equiv\frac{1}{4\pi}\int[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{\mathcal{E}}\times\boldsymbol{\mathcal{H}})]\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{151}$$

系がいくつかの粒子を含むときには，$\boldsymbol{\Pi}$ を運動量の和に，$\boldsymbol{M}$ を相対論的質量の和に，$(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{\Pi})$ を角運動量の和に置き換える必要がある．このように自明な修正を加えれば，三つの保存法則（149a），（149b），（150）はそのまま成り立つ．

ここで空間および時間反転について考えよう．

電荷 e を真のスカラーとし，場 $F^{\mu\nu}$ を真のテンソルとして取り扱うならば，運動方程式は空間の反転（$t\to t, \boldsymbol{r}\to -\boldsymbol{r}$）に関して不変である．この規約にしたがえば，$s^0$ は3次元空間におけるスカラー関数のように，$\boldsymbol{s}$ と $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ は極性ベクトルのように，$\boldsymbol{\mathcal{H}}$ は軸性ベクトルのように変換される．特に，変換法則

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(t,\boldsymbol{r})\longrightarrow-\boldsymbol{\mathcal{E}}(t,-\boldsymbol{r}),\qquad \boldsymbol{\mathcal{H}}(t,\boldsymbol{r})\longrightarrow\boldsymbol{\mathcal{H}}(t,-\boldsymbol{r}) \tag{152}$$

が成り立つ．

電荷 e をスカラーとし，$F^{\mu\nu}$ を《擬テンソル》として取り扱うならば，運動方程式は時間に関して可逆である（$t\to -t, \boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}$）．この規約にしたがえば，$s^0$ と $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ を $\boldsymbol{r}$ の関数とみなすとき，これらは時間反転に関して不変であり，$\boldsymbol{s}$ と $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ は符号を変える．特に，

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(t,\boldsymbol{r})\longrightarrow+\boldsymbol{\mathcal{E}}(-t,\boldsymbol{r}),\qquad \boldsymbol{\mathcal{H}}(t,\boldsymbol{r})\longrightarrow-\boldsymbol{\mathcal{H}}(-t,\boldsymbol{r}) \tag{153}$$

が成り立つ．

§ 19. 電子の自己エネルギーと古典半径

この段階で，輻射に関する古典理論の重大な難点を一つ指摘しておきたい．いままでの議論ではいつでも，各粒子の電荷はごく小さな体積，たとえば小さな球のなかに集中し，その半径 a は0に近づけられるものとしてきた．実際には，厳密な点電荷という仮説は退けなければならない．たとえば，孤立した一つの電子を考え，これが座標原点に静止しているとみなし，この電子によって生じる場のエネルギー δm を計算してみよう．普通これを静電自己エネルギーと呼んでいる．実のところ，これは質量のくりこみの項である．§11の議論はここにもそのままあてはまるが，それによれば，実験的に観測される質量は事実上

$$m_{\text{exp.}}=m+\delta m$$

である．外部の領域（$r>a$）に生じる電場は $e\boldsymbol{r}/r^3$ であるから，公式（147a）により，

$$\delta m > \frac{e^2}{8\pi}\int\frac{\mathrm{d}r}{r^4} = \frac{e^2}{2a}$$

を得る．また $\delta m < m_{\text{exp.}}$ であるから，$a > e^2/2m_{\text{exp.}}$ が成り立つ．長さ

$$r_0 = \frac{e^2}{m_{\text{exp.}}}(\simeq 2.82 \times 10^{-13}\,\mathrm{cm})$$

は電子の古典半径と名づけられる．このように古典電子は r_0 程度の有限な大きさをもつ対象である．ところで，理論はこのような対象の安定性を取り扱うことができない．まして，その内部構造の詳細，すなわち領域 $r < r_0$ における電荷や電流の分布を考えることは不可能である．実際，電子を構成する諸要素のあいだを支配する電磁力は斥力の集まりであり，電子を分解する傾向をもつ．電子が安定であるためには，電磁的でない原因から生じた凝集力によって平衡が保たれなければならない．相対論的理論の場合，このような力を導入することは重大な困難に出会う．実際には，電子の内部構造に関する特別な仮定で間にあわせている．それゆえ，正確な予想を期待しうる現象は，この構造の詳細によって決定的な影響を受けない現象，すなわち十分長い波長（$\lambda \gg r_0$）に関係する現象だけである (16)．

§20. 電磁ポテンシャル．ゲージの選択

定義式

$$\mathscr{H} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}, \qquad \boldsymbol{\mathcal{E}} = -\partial \boldsymbol{A}/\partial t - \mathrm{grad}\,\varphi \tag{154}$$

にしたがうベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ とスカラー・ポテンシャル φ を導入すれば，方程式 (138)，(139) と同値でしかもいっそう簡単な方程式が得られる（第 20 章 (17) を参照）．このとき (138) は自動的に満たされる．(139) はつぎの方程式に同値である：

$$\ddot{\boldsymbol{A}} - \triangle \boldsymbol{A} + \mathrm{grad}\,(\dot{\varphi} + \mathrm{div}\,\boldsymbol{A}) = 4\pi\,\boldsymbol{s} \tag{155a}$$

$$\ddot{\varphi} - \triangle\varphi - \frac{\partial}{\partial t}(\dot{\varphi} + \mathrm{div}\,\boldsymbol{A}) = 4\pi\, s^0. \tag{155b}$$

方程式 (154) によって $\boldsymbol{A}$ と φ を定める際には一つの任意関数が入ってくる．実際，$G(t, \boldsymbol{r})$ を時間と空間に関する任意の関数とするとき，置換

$$\boldsymbol{A} \longrightarrow \boldsymbol{A} - \mathrm{grad}\,G, \qquad \varphi \longrightarrow \varphi + \partial G/\partial t \tag{156}$$

を施しても，これらの方程式は満たされる．このような置換の全体を**ゲージ変換**と呼ぶ（第 20 章，§20 を参照）．

(16) 量子論自体もまた同じような原因から《紫外発散》の困難を示す．しかし，古典論と量子論の類比をあまり遠くまで押し進めてはならない．対の生成のような現象によれば，《量子電子》には $\hbar/mc$ 程度の半径を与えることになる．この半径は r_0 の 137 倍に当たる．

上記の取り扱いがもたらす大きな利益の一つは，完全な共変形式で書き表わされることである．ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と φ は4元ベクトル A^{μ} をつくる（第20章 (6) を参照）．(154) によれば，ベクトル A^{μ} の回転 (rot) が $F^{\mu\nu}$ であり（第20章 (8) を参照），後者から前者は，任意関数の発散 (div) を除いて定められる．ゲージ変換 (156) は一つの発散を付け加えること，すなわち

$$A^{\mu} \longrightarrow A^{\mu} + \partial^{\mu} G \qquad (G \text{ は任意}) \tag{157}$$

にほかならない．方程式 (155) は

$$\Box A^{\mu} - \partial^{\mu}(\partial_{\nu} A^{\nu}) = 4\pi s^{\mu} \tag{158}$$

と書き表わされる．

ポテンシャルにローレンツ条件

$$\partial_{\nu} A^{\mu} = 0 \tag{159}$$

を課することにより，この理論の形式的な共変性を損わずにゲージの任意さを制限することができる．

ポテンシャルの運動方程式はこのときいっそう簡単な形

$$\Box A^{\mu} = 4\pi s^{\mu} \tag{160}$$

をとる．方程式 $\Box\chi = 0$ の任意の解を χ とすれば，ローレンツ条件によってポテンシャルのゲージは一つの関数 χ を除いて定められる．言いかえれば，場 $F^{\mu\nu}$ の定義と方程式 (159), (160) はローレンツのゲージ変換

$$A^{\mu} \longrightarrow A^{\mu} + \partial^{\mu} \chi \qquad (\Box\chi = 0) \tag{161}$$

に関して不変である（これは時として特殊ゲージ変換と呼ばれる）．条件

$$\operatorname{div} \boldsymbol{A} = 0 \tag{162}$$

を課しても，きわめて簡単な運動方程式が得られる．ローレンツ条件とは違って，この条件は理論の形式的な共変性を保たない．しかしこの条件はゲージの任意さを完全に取り除くという利点をもつ．こうして得られるゲージは輻射ゲージと呼ばれるのが普通である．以下で採用するのはすべてこれである．このゲージによる輻射理論を調べる前に，ベクトル場の分解に関する重要な性質を一つ復習しておこう．

§21. ベクトル場の縦成分と横成分

任意の実または複素ベクトルの場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ は，渦のない場 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ と発散のない場 $\boldsymbol{B}_{\perp}$ の重ね合わせであるとみなすことができる．すなわち，

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{B}_{\parallel}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{B}_{\perp}(\boldsymbol{r}) \tag{163}$$

であって，

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B}_{\parallel}=0,\qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{B}_{\parallel}=\mathrm{div}\,\boldsymbol{B},\tag{164}$$

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{B}_{\perp}=0,\qquad \mathrm{rot}\,\boldsymbol{B}_{\perp}=\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B}\tag{165}$$

が成り立つ．二乗積分可能なベクトル場に限定すれば，この分解は一意的である (17)．このように定められた場 $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ と $\boldsymbol{B}_{\perp}$ はそれぞれ場 $\boldsymbol{B}$ の**縦成分**と**横成分**であると定義する．これについてはまたつぎの関係が成り立つ：

$$\boldsymbol{B}_{\parallel}=\mathrm{grad}\,U,\qquad U(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{\mathrm{div}\,\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}',\tag{166}$$

$$\boldsymbol{B}_{\perp}=\mathrm{rot}\,\boldsymbol{V},\qquad \boldsymbol{V}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi}\int\frac{\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'.\tag{167}$$

この分解はフーリエ変換を使って容易に行なわれる．$\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{B}_{\perp}$, $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ のフーリエ変換をそれぞれ $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{b}_{\perp}$, $\boldsymbol{b}_{\parallel}$ とする．すなわち

$$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{k})=(2\pi)^{-3/2}\int\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r},\qquad \boldsymbol{b}_{\perp},\boldsymbol{b}_{\parallel}\ \text{も同様.}\tag{168}$$

(164) と (165) はそれぞれつぎの式に同値である：

$$\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}_{\parallel}=0,\qquad (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}_{\parallel})=(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}),\qquad (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}_{\perp})=0,\qquad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}_{\perp}=\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{b}.$$

$\boldsymbol{b}_{\parallel}$ はベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向への $\boldsymbol{b}$ の射影である．このことから $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ は縦成分と呼ばれる (18)．$\boldsymbol{b}_{\perp}$ はベクトル $\boldsymbol{k}$ に垂直な方向への $\boldsymbol{b}$ の射影である．このことから $\boldsymbol{B}_{\perp}$ は横成分と呼ばれる．等式 (166) と (167) はそれぞれ

$$\boldsymbol{b}_{\parallel}=\boldsymbol{k}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{k})/k^2,\qquad \boldsymbol{b}_{\perp}=\boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{k})/k^2\tag{169}$$

に同値である．関数 U (定義 (166)) をフーリエ変換すれば，

$$u(\boldsymbol{k})=-\mathrm{i}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{k})/k^2$$

である［注意；$1/r$ のフーリエ変換は $\sqrt{2\pi}/\pi k^2$ である］．

もっと一般に，二乗積分可能なベクトル場のつくる空間——すなわちスピン 1 の 1 粒子の波動関数がつくる空間——は二つの直交部分空間，縦の場から成る空間と横の場から成る空間，の直和である (*)．いま取り扱っている分解は，$\boldsymbol{B}$ をこれらの相補部分空間への

---

(17) $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ と $\boldsymbol{B}_{\perp}$ も二乗積分可能であると仮定しなければならない．二乗積分可能でない場に対してこの分解をすることも起こるであろう．そのときには，縦成分と横成分はそれぞれ (166) と (167) によって曖昧さなく定められる．

(18) $\boldsymbol{B}$ の動径成分すなわちベクトル $\boldsymbol{r}$ の方向への $\boldsymbol{B}$ の射影 $\boldsymbol{B}_{\mathrm{rad.}}=\boldsymbol{r}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{r})/r^2$ と $\boldsymbol{B}_{\parallel}$ を混同してはならない．純粋に横成分だけから成る場でも，その動径成分は一般に 0 でないことに十分注意せよ．

(*) ［訳注］ $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}),\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ が無限遠で十分速く 0 に近づくベクトル場であるとき，(ベクトル場に関する) 内積を

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})=\int\boldsymbol{A}^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

↗

射影の和として書き表わすことに当たる．適当な基底系を選べば，これらの射影は自動的に得られる．実際，$\boldsymbol{L}^{(1)}, \boldsymbol{L}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{L}^{(\lambda)}, \cdots$ を縦の場の完全直交規格化列とし，$\boldsymbol{T}^{(1)}, \boldsymbol{T}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{T}^{(\tau)}, \cdots$ を横の場の完全直交規格化列とする．すなわち

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{L}^{(\lambda)} = 0, \qquad \int (\boldsymbol{L}^{(\lambda)*}\cdot \boldsymbol{L}^{(\lambda')})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{\lambda\lambda'}, \tag{170a}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{T}^{(\tau)} = 0, \qquad \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)*}\cdot \boldsymbol{T}^{(\tau')})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \delta_{\tau\tau'}, \tag{170b}$$

$$\sum_\lambda L_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{r}) L_j^{(\lambda)*}(\boldsymbol{r}') + \sum_\tau T_i^{(\tau)}(\boldsymbol{r}) T_j^{(\tau)*}(\boldsymbol{r}') = \delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{170c}$$

$$(i, j = x, y, z).$$

ここで

$$\beta_\parallel^{(\lambda)} = \int (\boldsymbol{L}^{(\lambda)*}\cdot \boldsymbol{B})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \qquad \beta_\perp^{(\tau)} = \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)*}\cdot \boldsymbol{B})\,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{171}$$

と置けば，

$$\boldsymbol{B}_\parallel = \sum_\lambda \beta_\parallel^{(\lambda)} \boldsymbol{L}^{(\lambda)}, \qquad \boldsymbol{B}_\perp = \sum_\tau \beta_\perp^{(\tau)} \boldsymbol{T}^{(\tau)}. \tag{172}$$

フーリエ変換を使うということは，特殊な基底系として，縦と横の平面波から成る系を選ぶことに帰着する．波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の一つ一つに縦の場

$$\boldsymbol{L}^{(\boldsymbol{k})} = (2\pi)^{-3/2}\,\hat{\boldsymbol{k}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad (\hat{\boldsymbol{k}} \equiv \boldsymbol{k}/k) \tag{173a}$$

と，二つの直交する横の場

$$\boldsymbol{T}^{(\boldsymbol{k}\varpi)} = (2\pi)^{-3/2}\,\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad (\varpi = 1, 2) \tag{173b}$$

が結びつけられる．$\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}$ と $\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}$ は $\boldsymbol{k}$ に直交し，互いに直交するように選ばれた任意の単位ベクトルである (19)．すなわち，

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}) = (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}) = 0 \tag{174a}$$

$$(\boldsymbol{\epsilon}^{(1)*}\cdot\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}) = (\boldsymbol{\epsilon}^{(2)*}\cdot\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}) = 1, \qquad (\boldsymbol{\epsilon}^{(1)*}\cdot\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}) = 0. \tag{174b}$$

この基底に関する $\boldsymbol{B}$ の成分（定義 (171)）はベクトル $\boldsymbol{b}_\parallel$，$\boldsymbol{b}_\perp$ とつぎの式によって結びつけられる（式 (169) を参照）：

$$\boldsymbol{b}_\parallel = \beta_\parallel^{(\boldsymbol{k})}\hat{\boldsymbol{k}}, \qquad \boldsymbol{b}_\perp = \sum_\varpi \beta_\perp^{(\boldsymbol{k}\varpi)}\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi)}. \tag{175}$$

ここで平面波は連続な添字 $\boldsymbol{k}$ に依存し，$\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ に規格化されている．とびとびの添

↘ とする．この意味で $(\boldsymbol{B}_\parallel, \boldsymbol{B}_\perp) = 0$ であることは，

$$(\boldsymbol{B}_\parallel^*\cdot\boldsymbol{B}_\perp) = (\operatorname{grad} U^*)\cdot(\operatorname{rot}\boldsymbol{V}) = \operatorname{div}(U^*\operatorname{rot}\boldsymbol{V})$$

を積分し，ガウスの定理を使えばわかる．

(19) これらのベクトルは必ずしも実でないことに注意する．あるベクトルの直交座標成分が実数であるとき，そのベクトルは実であると定義する．ベクトル $\boldsymbol{k}$ は実ベクトルである．二つの複素ベクトル $\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{B}$ の内積は

$$(\boldsymbol{A}^*\cdot\boldsymbol{B}) = A_x^* B_x + A_y^* B_y + A_z^* B_z$$

であると定義する．

字だけを取り扱うために，慣用の技巧にしたがい，長さ L の辺をもつ立方体によって系を囲むこともできる．このときには定義 (173a)，(173b) にある定数 $(2\pi)^{-3/2}$ を $L^{-3/2}$ に置き換えなければならない．

このほか，普通用いられる基底系には球面波がある．これには §29 でたちもどる．

§22. 縦の場の消去

マクスウェルの方程式のうち，方程式 (138b) と (139b) は本来の意味の運動方程式ではなく，場 $\mathcal{E}$ と $\mathcal{H}$ に課せられた束縛条件である．これらの効果は，上記の場の縦成分を固定することにある．

方程式 (138b) により，$\mathcal{H}_{\parallel}$ は 0 である．方程式 (139b) により，$\mathcal{E}_{\parallel}(t, \boldsymbol{r})$ は電荷の分布 $s_0(t, \boldsymbol{r})$ によって生じる静電場である．それゆえ系の力学的状態を定めるには，一方では電荷と電流の分布——すなわち粒子の位置と速度——が与えられ，他方では横の場 $\mathcal{H}$ と $\mathcal{E}_{\perp}$ が与えられればよい．そこでこの理論をつくり直し，電磁場の縦成分を完全に消去することができる．

この消去をただちに始めるよりは，まず輻射ゲージによるポテンシャル $(\varphi, \boldsymbol{A})$ を導入する方がよい (式 (162) を参照)．これは単なる変数変換の問題である．場 $\boldsymbol{A}$ は定義により純粋に横の場である．すなわち

$$\boldsymbol{A}_{\parallel} = 0, \qquad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_{\perp}. \tag{176}$$

古い変数は (154) により新しい変数の関数として与えられる．すなわち，

$$\mathcal{E}_{\parallel} = -\operatorname{grad}\varphi \tag{177}$$

$$\mathcal{H} = \operatorname{rot}\boldsymbol{A}, \qquad \mathcal{E}_{\perp} = -\partial\boldsymbol{A}/\partial t. \tag{178}$$

φ は (155b) によって定められるが，この場合は

$$\triangle\varphi = -4\pi s^0 \tag{179}$$

と書かれる．したがって

$$\varphi(t, \boldsymbol{r}) = \int \frac{s^0(t, \boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{180}$$

であり，これから上に述べたように $\mathcal{E}_{\parallel}$ を s^0 の関数として表わす式が導かれる．方程式 (155a) から φ を消去するには，縦成分の等式と横成分の等式を別々に書けばよい．これら二つの等式のうち，第一式

$$\operatorname{grad}\dot{\varphi} = 4\pi\,\boldsymbol{s}_{\parallel} \tag{181}$$

は，φ が (180) を満たすならば恒等的に成り立つ [20]．

[20] 実際，この等式が満たされるためには，両辺の発散が等しいこと，すなわち $\triangle\dot{\varphi} = 4\pi \operatorname{div}\boldsymbol{s}$ が言えればよい．ところで，この等式は (179) から導き出される．そのためには (179) の両辺を時間に関して微分し，連続の方程式を使えばよい．

第二式は φ を含まない. それは運動方程式

$$\ddot{\boldsymbol{A}} - \triangle \boldsymbol{A} = 4\pi \boldsymbol{s}_{\perp} \tag{182}$$

である.

残っているのは粒子の運動方程式 (式 (142), (143)) から縦成分を消去すること, すなわち粒子の一つ一つを支配するローレンツ力の表示式から縦成分を消去することである. 各粒子に結びついたいろいろな量は§17と同じ記号で表わし, 粒子を互いに区別するために添字 1, 2, …, n, … を付ける. たとえば, 電荷の密度に対する第 n 粒子の寄与は

$$s_n^0 = e_n \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n)$$

である. それゆえ方程式 (179) は

$$\triangle \varphi = -4\pi \sum_n e_n \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n) \tag{183}$$

と書かれ, これの解はクーロン・ポテンシャル

$$\varphi = \sum_n e_n / |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_n| \tag{184}$$

である.

第 i 粒子を支配するローレンツ力を $\boldsymbol{F}_i$ とすれば, これをつぎのように書くことができる:

$$\boldsymbol{F}_i = \boldsymbol{F}_i^{\text{tr.}} + \boldsymbol{F}_i^{\text{long.}}$$

$$\boldsymbol{F}_i^{\text{tr.}} = e_i(\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\perp}(i) + \boldsymbol{V}_i \times \boldsymbol{\mathcal{H}}(i)) = e_i\left(-\frac{\partial \boldsymbol{A}(i)}{\partial t} + \boldsymbol{V}_i \times \operatorname{rot} \boldsymbol{A}(i)\right) \tag{185}$$

$$\boldsymbol{F}_i^{\text{long.}} = e_i \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\parallel}(i) = -e_i \operatorname{grad} \varphi(i).$$

ここで $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\perp}(i), \boldsymbol{\mathcal{H}}(i), \cdots$ は点 $\boldsymbol{R}_i$ において $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\perp}, \boldsymbol{\mathcal{H}}, \cdots$ がとる値である. (184) によって与えられる $\operatorname{grad} \varphi(i)$ の式を $\boldsymbol{F}^{\text{long.}}$ に代入すれば, 求める消去が得られる.

しかしながら, ポテンシャル φ は点 $\boldsymbol{R}_i$ で発散するから, このままでは代入するわけにはゆかない. この困難は, 電荷が厳密に点電荷であるかのように取り扱っているところから生じる. $\boldsymbol{F}_i^{\text{long.}}$ は, 現にある電荷の全体が i 番目の粒子に及ぼす静電気力である. i 番目の粒子自体のもつ電荷がこの力にもたらす寄与を $\boldsymbol{F}'_i$ で表わし, 他の電荷全体の寄与を $\boldsymbol{F}_i^{\text{coul.}}$ とする. 粒子が互いに十分離れている限り, $\boldsymbol{F}_i^{\text{coul.}}$ の計算をするときには点電荷であると仮定することができる. したがって,

$$\boldsymbol{F}_i^{\text{coul.}} = \sum_{n \neq i} e_i e_n (\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_n) / |\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_n|^3. \tag{186}$$

しかし $\boldsymbol{F}'_i$ の計算に対しては, 点電荷の仮定は明らかに正しくない. 実際は, i 番目の粒子の内部における電荷の分布がどのようになっていても,

$$\boldsymbol{F}'_i = 0$$

を得る.

結局, 各粒子を支配する力は横の場のローレンツ力 (式 (185)) と, 他のすべての電荷

の存在による静電気力（式（186））である．すなわち

$$F_i = F_i^{\mathrm{tr.}} + F_i^{\mathrm{coul.}}. \tag{187}$$

§23. エネルギー．運動量．角運動量

運動方程式から縦の場を消去することはすませたので，今度はエネルギー，運動量，角運動量の保存法則から縦の場を消去する．

場のエネルギーを表わす式（147a）において，$\mathcal{E}$ を $\mathcal{E}_\perp$ に置き換えれば，新しい式 U を得るが，これは横の成分しか含まない．これを前のものと区別するために，**輻射のエネルギー**と名づける．すなわち

$$U \equiv \frac{1}{8\pi}\int(\mathcal{E}_\perp^2 + \mathcal{H}^2)\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{188}$$

同様に**輻射の運動量** $\boldsymbol{X}$（式（147b）を参照）と**輻射の角運動量** $\boldsymbol{G}$（式（151）を参照）をつぎのように定義する：

$$\boldsymbol{X} \equiv \frac{1}{4\pi}\int(\mathcal{E}_\perp \times \mathcal{H})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{189}$$

$$\boldsymbol{G} \equiv \frac{1}{4\pi}\int[\boldsymbol{r} \times (\mathcal{E}_\perp \times \mathcal{H})]\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{190}$$

U，$\boldsymbol{X}$，$\boldsymbol{G}$ はそれぞれ電荷がないときの系のエネルギー，運動量，角運動量を表わす．

さらに，スカラー場のエネルギー，運動量，角運動量を表わすために第I節で与えられた式（§4，6，7を参照）と同じような形に上記の量を書き表わすこともできる．（188），（189），（190）において $\mathcal{H}$ を rot $\boldsymbol{A}$ に置き換え，部分積分を何回か施し，$\mathcal{E}_\perp$ と $\boldsymbol{A}$ が横の場であって無限遠では0になるという事実を使えば，つぎの式が得られる：

$$U = \frac{1}{8\pi}\int\sum_i(\mathcal{E}_{\perp i}^2 + (\nabla A_i)^2)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{188'}$$

$$\boldsymbol{X} = \frac{1}{4\pi}\int\sum_i \mathcal{E}_{\perp i}(\nabla A_i)\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \tag{189'}$$

また，

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}^{(0)} + \boldsymbol{G}^{(s)}, \tag{190'}$$

ただし，

$$\boldsymbol{G}^{(0)} \equiv \frac{1}{4\pi}\int\sum_i \mathcal{E}_{\perp i}(\boldsymbol{l}A_i)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{191a}$$

$$\boldsymbol{G}^{(s)} \equiv \frac{1}{4\pi}\int(\mathcal{E}_\perp \times \boldsymbol{A})\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{191b}$$

これらの式を得るには，いつでもテンソル計算の技巧と記号を使うのが便利である．特に，3次元ユークリッド空間の反対称テンソル ε_{ijk}（定義は第13章，注 (2) に与えられている）と，等式

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}=\delta_{il}\delta_{jm}-\delta_{im}\delta_{jl}$$

が利用される．たとえば，

$$\mathcal{H}^2=(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})^2=\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\frac{\partial A_j}{\partial x_i}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}=\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}-\frac{\partial A_l}{\partial x_m}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}$$

$$=\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}-\frac{\partial}{\partial x_l}\left(A_m\frac{\partial A_l}{\partial x_m}\right)+A_m\frac{\partial^2 A_l}{\partial x_m\partial x_l}$$

であり，$\boldsymbol{A}$ は無限遠で0になる横の場であるから，

$$\int\mathcal{H}^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\equiv\int\sum_m(\nabla A_m)^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

となり，これから(188′) が導かれる．同じような技巧を使って，

$$(\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp\times\boldsymbol{\mathcal{H}})_i=\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{klm}\mathcal{E}_{\perp j}\frac{\partial A_m}{\partial x_l}=\mathcal{E}_{\perp m}\frac{\partial}{\partial x_i}A_m-\frac{\partial}{\partial x_l}(\mathcal{E}_{\perp l}A_i)$$

が得られ，これから (189′) が導かれる．また，

$$(\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp\times\boldsymbol{\mathcal{H}}))_i=\mathcal{E}_{\perp m}\left(\varepsilon_{ijk}x_j\frac{\partial A_m}{\partial x_k}\right)-\frac{\partial}{\partial x_l}(\varepsilon_{ijk}\,x_j\mathcal{E}_{\perp l}A_k)+\varepsilon_{ijk}\mathcal{E}_{\perp j}A_k$$

から，$\boldsymbol{G}^{(0)}$ と $\boldsymbol{G}^{(s)}$ の定義 (191a)，(191b) を参照して (190′) が導かれる．

これらの式とスカラー場に関する式との比較は示唆に富む．たとえば場のエネルギーを表わす式 (30) と (188′) をくらべよう．両者の相違はつぎのことからくる．i) 場 $\boldsymbol{A}$ はベクトル場であり，ii) その質量は0 ($\mu=0$) であり，iii) ここで使った場の単位は第I節で採用したものと因数 $\sqrt{4\pi}$ だけ異なる．これらのことは別にして，(178) の第2式が暗示するように——これはまた以下で確かめられることであるが——場 $\boldsymbol{A}$ は正準共役モーメントとして ($-\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp$) をもつ．このことを認めるならば，(188′) は (30) の簡単な一般化であるとみなされる．同じ注意は運動量や角運動量を表わす式 (式 (55) と (189′)，(61) と (190′)) についても繰り返すことができる．場のベクトル的な性格は角運動量に関して特に顕著に見られる．すなわち，スカラー場の角運動量を表わす式から単純な一般化によって得られる項 $\boldsymbol{G}^{(0)}$ のほかに，補助の項 $\boldsymbol{G}^{(s)}$ が現われるのである．$\boldsymbol{G}^{(0)}$ は《軌道角運動量》を表わし，$\boldsymbol{G}^{(s)}$ は場の《スピン》を表わす [21]．

---

(21) 今の場合に，事柄を複雑にしているのは横成分であるための条件である．これから生じるいろいろな結果の一つに，空間の各点における場 $\boldsymbol{A}$ の振幅が独立な力学変数の集合をつくっていないということがある．問題5で与えられている交換関係の特殊な形式も同じ理由による．また同じ理由によって，ベクトル演算子 $\boldsymbol{G}^{(0)}$ と $\boldsymbol{G}^{(s)}$ を個々に考えると，角運動量に特有の交換関係を満たさない．

さてわれわれは，電磁場およびこれと相互作用する荷電粒子の集まりによってつくられた系の全エネルギー，全運動量，全角運動量に対し，§18で得た式から縦の場を消去する段階に達した．

まず系の全運動量を考える．§18で与えた定義によれば，

$$\boldsymbol{P}_{\text{tot.}} = \sum_n \boldsymbol{\Pi}_n + \boldsymbol{W} = \sum_n \boldsymbol{\Pi}_n + \boldsymbol{X} + \boldsymbol{X}', \tag{192}$$

ただし

$$\boldsymbol{X}' \equiv \frac{1}{4\pi}\int(\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\parallel} \times \boldsymbol{\mathcal{H}})\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\parallel}$ と $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ をこれらの定義式 (177)，(178) に置き換えると，

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\parallel} \times \boldsymbol{\mathcal{H}} = -(\operatorname{grad}\varphi \times \boldsymbol{\mathcal{H}}) = \varphi \operatorname{rot}\boldsymbol{\mathcal{H}} - \operatorname{rot}(\varphi\boldsymbol{\mathcal{H}}) = -\varphi(\triangle \boldsymbol{A}) - \operatorname{rot}(\varphi\boldsymbol{\mathcal{H}})$$

となる．部分積分を施し，φ と $\boldsymbol{A}$ が無限遠で0になることを考慮すれば，順に

$$\boldsymbol{X}' = -\frac{1}{4\pi}\int\varphi(\triangle \boldsymbol{A})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\frac{1}{4\pi}\int \boldsymbol{A}(\triangle\varphi)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

を得る．(183) により $\triangle\varphi$ は δ 関数の和であるから，積分は容易に行なわれ，

$$\boldsymbol{X}' = \sum_n e_n \boldsymbol{A}(n)$$

を得る．ただし，前に採用した規約どおり，$\boldsymbol{A}(n) \equiv \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}_n)$．この式を (192) に代入してみれば，関係

$$\boldsymbol{P}_n \equiv \boldsymbol{\Pi}_n + e_n \boldsymbol{A}(n) \tag{193}$$

により第 n 粒子の運動量 $\boldsymbol{P}_n$ を定義すればよいことがわかる [22]．このとき全運動量は

$$\boldsymbol{P}_{\text{tot.}} = \sum_n \boldsymbol{P}_n + \boldsymbol{X} \tag{194}$$

と書き表わされる．これは粒子の運動量と輻射の運動量の和である．この和は運動の定数である．

角運動量もまったく同じように処理される．第 n 粒子の角運動量 $\boldsymbol{L}_n$ は

$$\boldsymbol{L}_n \equiv \boldsymbol{R}_n \times \boldsymbol{P}_n \tag{195}$$

という関係で定義すればよいことがわかる．$\boldsymbol{P}_n$ は上に述べた定義どおりの運動量である．系の全角運動量を表わす式を計算すれば，

$$\boldsymbol{J}_{\text{tot.}} = \sum_n \boldsymbol{L}_n + \boldsymbol{G} \tag{196}$$

を得る．

最後に，系の全エネルギーを考える．§17で与えた定義により，これは

---

[22] われわれは輻射ゲージを使っており，場 $\boldsymbol{A}$ は純粋に横の場であることを思い出そう．もっと一般に，

$$\boldsymbol{P}_n \equiv \boldsymbol{\Pi}_n + e\boldsymbol{A}_{\perp}(n)$$

と置けば，ゲージに無関係な定義を得る．

$$\sum_n M_n + U + U'$$

ただし，

$$U' \equiv W^0 - U \equiv \frac{1}{8\pi}\int \mathcal{E}_{\parallel}^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

という形に書き表わされる．$\mathcal{E}_{\parallel}$ をその定義式に置き換え，部分積分をすれば，

$$U' = \frac{1}{8\pi}\int (\mathrm{grad}\,\varphi)^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\frac{1}{8\pi}\int \varphi(\triangle\varphi)\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

を得る．

φ は現にある電荷によって生じる静電ポテンシャルである．今までやってきたように，電荷を厳密に点電荷として取り扱えば，

$$U' = \frac{1}{2}\sum_n\sum_p \frac{e_n e_p}{|\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_p|}$$

を得る．この二重和のなかで，《交さ項》$(n \neq p)$ の全体はこの粒子の集まりのクーロン・エネルギー，すなわち

$$H_{\mathrm{coul.}} \equiv \sum_{n<p} \frac{e_n e_p}{|\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{R}_p|} \tag{197}$$

を表わす．[記号 $\sum_{n<p}$ は粒子対の全部についての和を表わす]．〔$n = p$ の〕《平方項》に関しては，これらは無限大である．ここに現われる困難は §22 の終りで $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{long.}}$ を計算したときに出会ったものと同じ原因による．i 番目の平方項は，i 番目の粒子の電場における i 番目の粒子自体の静電エネルギーを表わす．このエネルギー u_i' は，この粒子の内部における電荷の分布によって決定的に左右され，この粒子の半径を 0 に近づける極限において無限大となる（§19 を参照）．自己エネルギーの正確な値を得ようとすれば，§19 に述べた凝集力の寄与をこの項に付け加える必要があろうが，当面の計算では考慮に入れない．粒子の内部構造に関する一貫した理論がない現状では，質量エネルギー M_i の式において静止質量 m_i を適当に修正することにより，これらの《自己エネルギー》の項はいずれも無視できるということを議論なしに認めておく．この仮定のもとで，系の全エネルギーを表わす式はつぎのようになる：

$$E_{\mathrm{tot.}} = \sum_n M_n + H_{\mathrm{coul.}} + U. \tag{198}$$

すなわち，粒子の質量エネルギー，粒子のクーロン・エネルギー，輻射エネルギーの和である．

§24.　自由波のハミルトニアン

§22 で得られた運動方程式は正準形に書き表わされる．われわれはまず自由輻射の場

合，すなわち電荷がないときの電磁場の場合を取り扱う．

輻射の力学的状態は各瞬間において，横の場 $\boldsymbol{A}$ とその速度 $\partial \boldsymbol{A}/\partial t$ を与えることによって定められる．電場と磁場は方程式 (178) によってこれら二つのベクトル場に結びつけられる．これらの時間的変化は運動方程式 (182) によって定められ，電荷と電流がないとき，この方程式は

$$\square \boldsymbol{A} \equiv \ddot{\boldsymbol{A}} - \triangle \boldsymbol{A} = 0 \qquad (\mathrm{div}\, \boldsymbol{A} = 0) \tag{199}$$

となる．

これは自由スカラー場を表わす方程式と同じである（式 (1) を参照）．違う点はただ，ここでの場は横のベクトル場であってスカラー場でないこと，そして質量の項が 0 であることだけから生じる．これらの点を別にすれば，第 I 節でスカラー場に対してとった道筋をそのままたどることにより，正準形式論をつくり上げることができる．§21 で定めたのと同じように，$\boldsymbol{T}^{(1)}, \boldsymbol{T}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{T}^{(\tau)}, \cdots$ は横の場から成る完全直交規格化系であるとする（式 (170b)）．さらに，これが実の標準座標 (coordonnées normales réelles) の基底系であること，すなわち

$$\boldsymbol{T}^{(\tau)*} = \boldsymbol{T}^{(\tau)}, \qquad (\triangle + k_\tau^2)\boldsymbol{T}^{(\tau)} = 0 \tag{200}$$

であることを仮定する．対応する標準座標 q_τ は

$$q_\tau = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)} \cdot \boldsymbol{A}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{201}$$

によって定められている（式 (6) を参照）．これは時刻の実関数であって，振動数 k_τ の調和振動を特徴づける運動方程式

$$\ddot{q}_\tau + k_\tau^2 q_\tau = 0 \tag{202}$$

を満たす．このような振動はハミルトニアン

$$h_\tau = \frac{1}{2}(p_\tau^2 + k_\tau^2 q_\tau^2) \tag{203}$$

によって与えられる．ここで p_τ は q_τ の正準共役モーメントである．p_τ は $\dot{q}_\tau$ に等しく，場の《速度》$\dot{\boldsymbol{A}}$ から関係

$$p_\tau = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int (\boldsymbol{T}^{(\tau)} \cdot \dot{\boldsymbol{A}}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{204}$$

によって導き出される．自由輻射の全ハミルトニアン $H_{\mathrm{ray.}}$ は，すべての固有振動に関するハミルトニアンの和をとることによって得られる．すなわち，

$$H_{\mathrm{ray.}} = \sum_\tau h_\tau. \tag{205}$$

定義 (201) と (204) に現われた因数 $1/\sqrt{4\pi}$ は，静電場に対するわれわれの単位の選

び方によるものである[23]．

$H_{\text{ray.}}$ は正準変数の関数として輻射エネルギーを表わす式である．実際，

$$\boldsymbol{A} = \sqrt{4\pi}\sum_{\tau} q_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)} \tag{206}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp = -\sqrt{4\pi}\sum_{\tau} p_\tau \boldsymbol{T}^{(\tau)} \tag{207}$$

が成り立つ（式 (178) を参照）．$\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ が直交規格化されていることと実であることから，

$$\int \boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r} = 4\pi\sum_{\tau} p_\tau^2 \tag{208}$$

が導かれる．他方，$\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ は方程式 (200) にしたがう横ベクトルであるから，部分積分をして，

$$\int\sum_{i}(\nabla A_i)^2\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\int\sum_{i} A_i(\triangle A_i)\mathrm{d}\boldsymbol{r} = 4\pi\sum_{\tau} k_\tau^2 q_\tau^2 \tag{209}$$

を得る．エネルギー U を表わす式 (188′) に (208) と (209) を代入すれば，

$$U = \frac{1}{2}\sum_{\tau}(p_\tau^2 + k_\tau^2 q_\tau^2) = H_{\text{ray.}}$$

を得る．

§25.　粒子の集まりと相互作用する輻射のハミルトニアン

一般の場合には，一方では輻射の力学的状態を記述するために前の§24で導入した変数 q_τ, p_τ をとり，他方では各粒子の位置と運動量を与える変数 $\boldsymbol{R}_n$, $\boldsymbol{P}_n$ をとって正準変数とすることができる．$\boldsymbol{P}_n$ は (193) によってこの粒子の狭義の運動量に結びつけられる．

§22の結果［$\boldsymbol{A}$ の運動を与える式 (182)，ローレンツ力を表わす式 (185), (186), (187)］から，これらの新しい変数に関する運動方程式は容易に導かれる．特に，自由振動子の方程式 (202) はつぎの方程式に置き換えなければならない：

$$\ddot{q}_\tau + k_\tau^2 q_\tau = \sqrt{4\pi}\sum_{n} e_n \boldsymbol{V}_n\cdot\boldsymbol{T}^{(\tau)}(n) \qquad (\boldsymbol{V}_n \equiv \dot{\boldsymbol{R}}_n;\ \boldsymbol{T}^{(\tau)}(n) \equiv \boldsymbol{T}^{(\tau)}(\boldsymbol{R}_n)). \tag{210}$$

これらの運動方程式はハミルトニアン

$$H \equiv H(q_\tau, p_\tau;\ \boldsymbol{R}_n, \boldsymbol{P}_n) = H_{\text{ray.}} + H_{\text{coul.}} + \sum_{n} H_n \tag{211}$$

によって，ハミルトンの正準形に書き表わされる．$H_{\text{ray.}}$ は (205) で表わされる自由輻射のハミルトニアン，$H_{\text{coul.}}$ は (197) で与えられるクーロン・ポテンシャル，H_n は第 n 粒子の質量エネルギーを正準変数の関数として表わしたもの，すなわち

$$H_n \equiv \sqrt{m_n^2 + (\boldsymbol{P}_n - e_n\boldsymbol{A}(n))^2} \tag{212}$$

である．ただし，

---

(23)　注 (14) を参照．

$$A(\boldsymbol{n}) = \sqrt{4\pi} \sum_{\tau} q_{\tau} \boldsymbol{T}^{(\tau)}(\boldsymbol{n}). \tag{213}$$

この重要な性質の証明には特に困難な点はないから，それは読者に委ねる．

IV. 輻射の量子論

§26. 自由輻射の量子化．光子

> 神は「光あれ」と言われた．すると光があった．神はその光を見て，良しとされた．…第1日である．(*)

電磁輻射の量子論は，対応原理を適用することにより，古典理論から導き出すことができる．それはスカラー場に関してすでに行なったのと同様である．

そのために，§24と25で展開したハミルトニアン形式を出発点にとる．

まず自由輻射を考える．古典論における実の力学変数 q_{τ}, p_{τ} には，交換関係（式 (11) を参照）

$$[q_{\tau}, q_{\tau'}] = [p_{\tau}, p_{\tau'}] = 0, \qquad [q_{\tau}, p_{\tau'}] = \mathrm{i}\delta_{\tau\tau'}$$

にしたがうオブザーバブルが対応する．系の変化を支配するハミルトニアンは，(203) と (204) によって定められる演算子 H_{ray}. である．それゆえ，輻射はプランクの法則にしたがって量子化された振動子の重ね合わせである．

§3のすべての議論，特に〈粒子〉的解釈に関する事柄は，すべてここでも繰り返される．輻射の〈粒子〉は**光子**と呼ばれる．振動のモード τ の一つ一つに，《波動関数》$\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ によって特徴づけられたある型の光子が結びつけられ，そのエネルギーは k_{τ} である．光子はボース＝アインシュタイン統計にしたがう．このことは輻射の熱力学的性質に関する実験的データ（黒体輻射の法則など）によく一致する．真空のエネルギーと真空中の場のゆらぎに関する §3の終りの注意は，ここでもまたそのまま繰り返される．

いま説明した量子化の方法は，どのような基底場の系 $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ を採用したかに無関係であるけれども，これらの場は実であることが仮定されている．しかし，この方法を定式化しなおして，場 $\boldsymbol{T}^{(\tau)}$ が複素場であるときにも成り立つようにすることができる．実際，複素波による量子化の方法を正当化した §5の証明は，いまの場合にもそっくり繰り返される．一般的な公式は容易に書かれるから，ここでは述べない．しかし平面波の場はいくらか詳しく取り扱い，つぎに球面波の場についていくつか簡単な情報を提供しよう．いろいろな展開が可能であるが，平面波による展開が最も多くの機会に用いられる．球面波によ

(*) ［訳注］ 旧約聖書《創世記》第一章からの引用．

る展開や多重極展開は，放出または吸収の問題に対して有効である．

§27. 平面波．輻射の運動量

平面波による展開を使って理論を構成する方法は，スカラー場に対して §6 で述べた方法を敷き写しにする．ここではスカラーの場合と異なる点をそのつど指摘しながら，重要な公式を述べる．

横の平面波の場から成る完全系を考える．とびとびの添字を導入するために，これらの場を一辺の長さ L の立方体で囲み，いつもの周期条件を立方体の境界につける．この基底系に属する場 $U^{(k\varpi)}$ は，波数ベクトル k，偏りの方向を定める量子数 $\varpi\,(\varpi=1,2)$ を与えることにより，つぎのように定められる：

$$U^{(k\varpi)}=L^{-3/2}\epsilon^{(\varpi)}e^{ik\cdot r}. \tag{214}$$

§21 で導入した $T^{(k\varpi)}$ を表わす式 (173b) はこれと規格化が違うだけである．ベクトル $\epsilon^{(1)}$, $\epsilon^{(2)}$ は (174) にしたがい，またこれによりユニタリ変換を除いて定められる．

各平面波 $U^{(k\varpi)}$ に対して，消滅演算子 $a_{(k\varpi)}$ と生成演算子 $a^\dagger_{(k\varpi)}$ を結びつける．場 A は展開

$$A=\sum_k\sum_\varpi (2\pi/k)^{1/2}(a_{(k\varpi)}U^{(k\varpi)}+a^\dagger_{(k\varpi)}U^{(k\varpi)*}) \tag{215}$$

により（式 (46) と (206) を参照），場 $\mathcal{E}_\perp$ は

$$\mathcal{E}_\perp=\sum_k\sum_\varpi i(2\pi k)^{1/2}(a_{(k\varpi)}U^{(k\varpi)}-a^\dagger_{(k\varpi)}U^{(k\varpi)*}) \tag{216}$$

によって（式 (47) と (207) を参照）表わされる．a と $a^\dagger$ は消滅および生成演算子に特有の交換関係

$$[a_{(k\varpi)},a_{(k'\varpi')}]=[a^\dagger_{(k\varpi)},a^\dagger_{(k'\varpi')}]=0 \tag{217a}$$

$$[a_{(k\varpi')},a^\dagger_{(k'\varpi')}]=\delta_{kk'}\delta_{\varpi\varpi'} \tag{217b}$$

にしたがう．演算子

$$N_{(k\varpi)}\equiv a^\dagger_{(k\varpi)}a_{(k\varpi)} \tag{218}$$

は状態 $U^{(k\varpi)}$ にある光子の個数を表わす．

輻射のハミルトニアン $H_{\mathrm{ray.}}$ は，真空のエネルギーをエネルギーの零点にとって固定するとき，

$$H_{\mathrm{ray.}}=\sum_k\sum_\varpi N_{(k\varpi)}k \tag{219}$$

である．

運動量 X は (189′) により演算子 $\mathcal{E}_\perp$ と A の関数として定められる．$\mathcal{E}_\perp$ と A にそれぞれ展開式 (216) と (215) を代入すれば，計算の結果は

$$X=\sum_k\sum_\varpi N_{(k\varpi)}\,k \tag{220}$$

となる（問題6）．(219) と (220) を調べれば，状態 $U^{(k\varpi)}$ にある光子は運動量 $\boldsymbol{k}$ とエネルギー k をもつ〈粒子〉——言葉をかえれば質量0と運動量 $\boldsymbol{k}$ をもつ〈粒子〉——であるということができる．

区間 $(k, k+\delta k)$ に入るような運動量をもつ光子の状態の個数は，$2(L/2\pi)^3\delta\boldsymbol{k}$ である．この式に現われる因数2は，与えられた運動量に対して線形独立な偏りの方向をもつ状態が二つ ($\varpi=1,2$) あることからくる．エネルギー k, Ω 方向を向いた運動量，<u>与えられた偏りの方向</u> ϖ (§6の定義) をもつ準位の密度 $\rho_L(k)$ は

$$\rho_L(k) = L^3 k^2/(2\pi)^3 \tag{221}$$

である（式 (49) を参照）．

§28. 光の偏り

与えられた運動量 $\boldsymbol{k}$ をもつ光子はそれらの偏りの方向によって互いに異なる．古典的には，偏りの方向は横の電場の振動の方向である．それは（位相を除いて定められた）実または複素単位ベクトルであり，伝播方向 $\boldsymbol{k}$ に垂直である．この定義はいまの場合にも容易に拡張される．$\boldsymbol{k}$ の値の一つ一つに，線形独立な二つの偏りの方向 $\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}, \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}$ が対応し，光子に起こりうる偏りはすべてこれら基底となる偏りの方向の線形（ユニタリ）結合である [24]．

基底となる偏りの方向として，二つの直交する**直線偏光**，すなわち二つの実ベクトル $\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}, \boldsymbol{\epsilon}^{(2)}$ をとることもできる．たとえば，$\boldsymbol{\epsilon}^{(1)}$, $\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}$, $\boldsymbol{k}$ を実ベクトルとし，これらが右手系の直角三面角をつくるようにとることができる．この条件により，基底は伝播軸のまわりの回転を除いて定められる．このとき，

$$\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi)*} = \boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi)}, \qquad \boldsymbol{\epsilon}^{(1)} \times \boldsymbol{\epsilon}^{(2)} = \boldsymbol{k}/k.$$

同様に，**円偏光**

$$\boldsymbol{e}^{(+)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{\epsilon}^{(1)} + \mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}), \qquad \boldsymbol{e}^{(-)} = \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{\epsilon}^{(1)} - \mathrm{i}\boldsymbol{\epsilon}^{(2)}) \tag{222}$$

を基底に使うこともできる．

$$\boldsymbol{e}^{(+)} = -\boldsymbol{e}^{(-)*}$$

に注意する．この基底に関する量には，記号 ^ をつけることにする．これにより，円偏光した光子の消滅演算子 $\hat{a}_{(k\eta)}$ と生成演算子 $\hat{a}^{\dagger}_{(k\eta)}$ が定められる．対応する平面波は

$$\hat{U}^{(k\eta)} \equiv L^{-3/2}\boldsymbol{e}^{(\eta)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad (\eta = + \text{ または } -)$$

---

(24) ここで取り扱っているのは純粋な場合だけである．これらは普通<u>完全に偏光している</u>場合と呼ばれる．<u>部分的に偏光している</u>状態は統計的混合である．これらは偏光の状態がつくる（2次元）空間の密度演算子で表わされる．

である．

円偏光の利点は本質的につぎの性質からくる：

円偏光した光子は伝播の方向にはっきり決まった角運動量をもつ．角運動量の成分は $+1$ または -1 に等しく，これは偏光が右まわり $(\eta=+)$ であるか左まわり $(\eta=-)$ であるかによって定まる．

実際，輻射が

$$|\boldsymbol{k}\pm\rangle\equiv\hat{a}^{\dagger}_{(\boldsymbol{k}\pm)}|0\rangle$$

によって定義される状態 $|\boldsymbol{k}\pm\rangle$ の一つにあると仮定しよう．これは運動量 $\boldsymbol{k}$ と右まわりの偏光（＋）または左まわりの偏光（－）をもつ光子を表わす．ベクトル演算子 $\boldsymbol{G}^{(0)}$ と $\boldsymbol{G}^{(s)}$ をそれぞれ（191a）と（191b）によって定めるとき，

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G}^{(0)})|\boldsymbol{k}\pm\rangle=0 \tag{223}$$

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G}^{(s)})|\boldsymbol{k}\pm\rangle=(\pm k)|\boldsymbol{k}\pm\rangle \tag{224}$$

であることが示される（問題8）．全角運動量 $\boldsymbol{G}$ は（190′）により，これら二つのベクトル演算子の和である．その $\boldsymbol{k}$ 方向の成分を G_k と書けば，

$$G_k\equiv(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{G})/k.$$

上の二つの式から，初めに述べた結果

$$G_k|\boldsymbol{k}\pm\rangle=(\pm 1)|\boldsymbol{k}\pm\rangle$$

が導かれる．　　（証明終）

この性質はスピン1の粒子を特徴づけるものである．一般に，スピン1の粒子がはっきり決まった運動量 $\boldsymbol{k}$ をもつとき，軌道角運動量の $\boldsymbol{k}$ 方向の成分は0になり，同じ方向のスピンの成分は三つの値 $+1$, 0, -1 のうちの一つをとりうる．しかし光子という特殊な場合には，スピンの成分の値0に対応する縦の平面波を消去しなければならない．

§29.　多重極展開．決まった角運動量と偶奇性をもつ光子

基底として平面波をとる代りに，それぞれ決まった角運動量と偶奇性の値に対応する球面波を利用することもできる．ここでは証明を付けないで重要な結果をあげるだけにしておく．証明をするにしても，大した困難は生じない．

ベクトル場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ は3成分をもつ一つの波動関数であって，スピン1の1粒子の力学的状態を表わすと考えられる．波動関数を構成する $\boldsymbol{B}$ の成分の選び方には，ある程度の任意さがある．たとえば三つの成分 B_x, B_y, B_z をとることもできる．しかし，いまの議論のためには，標準成分

$$B_+=-\frac{\sqrt{2}}{2}(B_x-\mathrm{i}B_y),\qquad B_0=B_z,\qquad B_-=\frac{\sqrt{2}}{2}(B_x+\mathrm{i}B_y)$$

をとる方がよい．これらの成分に目じるしを付けるための添字を $\mu(\mu=+,0,-)$ とすれば，この波動関数は $\boldsymbol{r}$ と μ の関数

$$\Psi(\boldsymbol{r},\mu)\equiv B_\mu(\boldsymbol{r})$$

である．この点に関して，スピン1の粒子とスピン1/2の粒子とのあいだには完全な平行性がある（第13章，§20—21を参照）．

スピン1をもつこの粒子のオブザーバブルは，位置 $\boldsymbol{r}$，運動量 $\boldsymbol{p}$，スピン $\boldsymbol{s}$ の関数である．ここで定めた表現においては，$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\nabla$ であり，スピンの成分 s_+，s_z，s_- を表わす行列は，第13章の式 (28) において $j=j'=1$ としたものによって与えられる．容易に確かめられるように $\boldsymbol{s}^2=2$ であり，これは角運動量1に特有の値である．

この粒子の軌道角運動量は

$$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p},$$

全角運動量は

$$\boldsymbol{j}\equiv\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$$

と定めることができる．$\boldsymbol{j}$ の成分がこのベクトル場の無限小回転に結びつけられることは，角運動量演算子に関する普通の定義と同じである．

さらに，われわれは偶奇性 P をつぎのように定義する．P は一つの演算子であって，これが場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ に作用すると，原点に関する反転によってその変換が与えられる [25]．すなわち

$$PB_\mu(\boldsymbol{r})=-B_\mu(-\boldsymbol{r}).$$

ここで，はっきり決まった角運動量 (jm) をもち，波動方程式

$$(\triangle+k^2)\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=0$$

を満たすベクトル場から成る完全基底をつくってみよう．これは $\boldsymbol{p}^2$，$\boldsymbol{j}^2$，j_z に共通な基底系を求めることに帰着する．対応する固有値はそれぞれ k^2，$j(j+1)$，m である．k は0から $+\infty$ までのすべての値をとり（有限な半径 R をもつ球の内部に場を閉じ込めることにより，k のスペクトルをとびとびにすることもできる），j は0から $+\infty$ までのすべての整数値，m は $-j$ から $+j$ までのすべての整数値をとることができる．

角運動量の加法性から導き出されるように，$\boldsymbol{p}^2$，$\boldsymbol{l}^2$，$\boldsymbol{j}^2$，j_z は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，組 (kjm) の一つ一つに，

i) $j\neq0$ ならば，三つの線形独立な状態が対応し，それぞれについて

$$l=j+1,\qquad j,\qquad j-1$$

---

[25] われわれは $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ が極性ベクトルの場であると仮定する．このことから，空間の反転演算に符号 $-$ が現われる．反転の符号を別にすれば，これからあとで述べる性質はすべて軸性ベクトルまたは擬ベクトルの場にも適用される．

が成り立つ；

ii) $j=0$ ならば，ただ一つの状態が対応し，$l=1$ が成り立つ．

これらの状態はまた，はっきり決まった偶奇性，すなわち

$$P=(-)^{l+1}$$

をもつ．

上に述べたように状態 (kjm) を l のとりうる値によって分類する代りに，これらを横または縦の性格と偶奇性によって分類することもできる．場の横または縦の性格は演算子 $(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})$ の性質に結びつけられる．実際，ここで採用した表現においては，

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})\equiv \mathrm{rot}, \qquad (\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2-\boldsymbol{p}^2\equiv \mathrm{grad\,div} \qquad (\equiv \mathrm{rot\,rot}+\Delta)$$

が成り立つ（第13章 (93)）．縦の場に対しては $(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2=0$，横の場に対しては $(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2-\boldsymbol{p}^2=0$．またつぎのことが示される：$\boldsymbol{p}^2$，$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2$，$P$，$\boldsymbol{j}^2$，$j_z$ は交換するオブザーバブルの完全集合をつくり，組 (kjm) の一つ一つに，

i) $j\neq 0$ ならば，三つの線形独立な状態が対応し，それぞれについて

$$\begin{array}{llll}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2= & 0 & k^2 & k^2\\ P=(-)^j & & (-)^j & (-)^{j+1}\end{array}$$

が成り立つ；

ii) $j=0$ ならば，ただ一つの状態が対応し，それは縦で偶の状態である．すなわち

$$(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{p})^2=0, \qquad P=+1$$

（これはすでに上で述べた $l=1$ の状態である）．

対応する基底関数をつくるために，スカラー場に関連して§7で導入した関数 u_{klm} をもう一度とり上げる．定義式 (60) に現われる定数は k のある関数であって，u_{kjm} の全体がスカラー関数の完全直交規格化系をつくるように選ばれているとする．組 (kjm) の一つ一つに，縦の状態がただ一つ対応する．対応する基底関数は

$$\boldsymbol{\Lambda}_{kjm}\equiv \mathrm{grad}\, u_{kjm}/k$$

（これは偶奇性 $(-)^j$ のベクトル場である）．$j=m=0$ の場合を除けば，組 (kjm) の一つ一つに横の状態が二つ対応し，それらは反対の偶奇性をもつ．対応する基底関数はそれぞれ

$$\boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm}\equiv \boldsymbol{l}u_{kjm}/\sqrt{j(j+1)} \qquad (P=(-)^{j+1}) \tag{225a}$$

$$\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm}\equiv \nabla\times\boldsymbol{l}u_{kjm}/k\sqrt{j(j+1)} \qquad (P=(-)^{j}) \tag{225b}$$

である [26]. ついでながら

$$\boldsymbol{\Theta}^{(\pm)}_{kjm} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{\Theta}^{(\mp)}_{kjm}/k$$

に注意しておく.

場 $\boldsymbol{\Theta}^{(\varpi)}_{kjm}$ (k は0から $+\infty$ まで変わる; $j=1,2,\cdots,\infty$; $m=-j,\cdots,+j$; $\varpi=+$ または $-$) の全体は横の場の完全直交規格化系をつくり, これによって輻射理論の演算子 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp$ を展開することができる. すなわち

$$\boldsymbol{A} = \sum_{kjm\varpi}\left(\frac{2\pi}{k}\right)^{1/2}[a^{(\varpi)}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\varpi)}_{kjm} + a^{(\varpi)\dagger}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\varpi)*}_{kjm}] \tag{226}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp = \sum_{kjm\varpi}(2\pi k)^{1/2}\mathrm{i}[a^{(\varpi)}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\varpi)}_{kjm} - a^{(\varpi)\dagger}_{kjm}\boldsymbol{\Theta}^{(\varpi)*}_{kjm}]. \tag{227}$$

慣用の言葉使いでは, これらの展開における $\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm}$ の項は電気 2^l 極子の寄与を表わし, $\boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm}$ の項は磁気 2^l 極子の寄与を表わす. 平面波による展開を使って行なわれた §27 の取り扱いは, すべて多重極展開を使って繰り返される. 演算子 $a^{(\varpi)}_{kjm}$ と $a^{(\varpi)\dagger}_{kjm}$ はそれぞれエネルギー k, 角運動量 (jm), 偶奇性 $(-)^j\varpi$ をもつ光子の消滅および生成演算子と解釈される. k, j, m, ϖ のスペクトルについてはさきに述べた. 角運動量0の光子が存在しないことに十分注意する.

§30. 原子系との相互作用

> 神はまた言われた,「天のおおぞらに光があって昼と夜とを分け…る光となれ」. 神は見て, 良しとされた. 第四日である. (*)

今度は粒子の集まりと相互作用する輻射を考える. この取り扱い方はスカラー場の場合と同様であるから, ここでは本質的な点だけを述べる.

この系のハミルトニアンは, いくつかの自明な修正を別にすれば, 古典理論の場合と同じである (式 (211) を参照). 問題になる修正は, 考えている粒子の力学的性質とスピンによって決まる. ここでは原子系, すなわち Z 個の電子と電荷 $-Ze$ の核から成る系に限定する ($e=$ 電子の電荷).

まず核はないものとし, (Z 電子 + 輻射) という系のハミルトニアンをつくる. このと

[26] ここに示した偶奇性は大多数の著者, 特に BLATT と WEISSKOPF の前掲書 (134頁脚注) によって与えられている偶奇性と反対の符号をもつ. ここで導入したベクトル場は極性ベクトルの場であるのに対して, これらの著者は軸性ベクトルの場を考えているからである.

(*) [訳注] 旧約聖書《創世記》第一章からの引用.

き全ハミルトニアンは (211) で与えられ，$H_{\text{ray.}}$ は自由輻射のハミルトニアン，$H_{\text{coul.}}$ は電子間のクーロン相互作用，H_n は場 $\boldsymbol{A}$ があるときの n 番目の電子に関するディラックのハミルトニアン，すなわち

$$H_n = (\boldsymbol{\alpha}_n\cdot(\boldsymbol{P}_n - e\boldsymbol{A}(n)) + \beta_n m \tag{228}$$

を表わす．$\boldsymbol{\alpha}_n$ と β_n は n 番目の電子に関するディラック行列である．

非相対論近似において，H_n から静止質量を差し引いた残りは，

$$(H_n)_{\text{NR}} = \frac{(\boldsymbol{P}_n - e\boldsymbol{A}(n))^2}{2m} - \frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}(n)) \tag{229}$$

となる．

H_n（式 (228)）のなかの電子－輻射相互作用の項は

$$H'_n = -e\int(\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{230}$$

と書き表わされる．ただし $\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r})$ は点 $\boldsymbol{r}$ における電子のディラックの流れの密度，すなわち

$$\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r}) \equiv \boldsymbol{\alpha}_n\delta(\boldsymbol{R}_n - \boldsymbol{r}) \tag{231}$$

を表わす（第20章 (143) を参照）．$e\boldsymbol{j}_n(\boldsymbol{r})$ は n 番目の電子の電流密度である．(230) のなかの $\boldsymbol{j}_n$ にその非相対論近似式（第20章 (189)，(190)）を代入すれば，非相対論近似における相互作用 $(H'_n)_{\text{NR}}$ が得られる．すなわち，

$$(H'_n)_{\text{NR}} \equiv H_n^{(\text{I})} + H_n^{(\text{II})} + H''_n \tag{232}$$

$$H_n^{(\text{I})} = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{P}_n\cdot\boldsymbol{A}(n) + \boldsymbol{A}(n)\cdot\boldsymbol{P}_n) \tag{233a}$$

$$H_n^{(\text{II})} = -\mathrm{i}\frac{e}{2m}[\boldsymbol{\sigma}_n((\boldsymbol{P}_n\times\boldsymbol{A}(n)) + (\boldsymbol{A}(n)\times\boldsymbol{P}_n))] = -\frac{e}{2m}(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\mathcal{H}}(n)) \tag{233b}$$

$$H''_n = \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{A}^2(n). \tag{233c}$$

これは確かに (229) に現われる電子－輻射相互作用になっている．

原子核の存在を考慮に入れるとき，系のハミルトニアンに付け加えなければならないのは，まず Z 個の電子の一つ一つと核のクーロン相互作用の項であり，さらに輻射がある場合の核のハミルトニアンである．後者は運動エネルギーの項と輻射との相互作用の項から成る [27]．核を無限に重いものとして取り扱う（本質的に非相対論的な）近似では，最後に述べた二つの項は無視できる．この場合，核は原点に固定されていると考えることができ，ハミルトニアンに付け加えるべき効果は，Z 個のクーロン引力項 $-Ze^2/R_n$ だけ

(27) 核は点電荷として取り扱うことができると仮定している．問題に関係する振動数が核の励起エネルギーにくらべて小さい限り，この近似は正しい．

である．このとき原子は単に Z 個の電子の集まりであって，各電子は外部ポテンシャル $-Ze^2/R$ にしたがい，電磁場と相互作用するものと考えられる．いま述べたハミルトニアンは

$$H = H_{\text{ray.}} + H_{\text{at.}} + H' \tag{234}$$

という形に書き表わすことができる．$H_{\text{ray.}}$ はいつものように自由輻射のハミルトニアンを表わす．$H_{\text{at.}}$ は本来の意味の原子のハミルトニアン，すなわち核のクーロン場のなかにあって互いにクーロン相互作用をおよぼしあう電子のハミルトニアンである．これはクーロン相互作用の項 $H_{\text{coul.}}$ と Z 個の電子の運動エネルギーの和である．H' は原子の電子と輻射とのあいだの相互作用の項である．これは (230) によって定められた Z 個の相互作用の項 H'_n の和である．以下では，非相対論近似で電子の運動を取り扱う．それゆえ H'_n に対しては (232) と (233) によって与えられた近似式を採用する．言いかえれば，

$$H' = H^{(\text{I})} + H^{(\text{II})} + H'', \tag{235}$$

ただし

$$H^{(\text{I})} = \sum_n H_n^{(\text{I})}, \qquad H^{(\text{II})} = \sum_n H_n^{(\text{II})}, \qquad H'' = \sum_n H''_n. \tag{235$'$}$$

このような系を調べるとき，普通二つの近似法が用いられる．

第一の方法は電磁輻射を古典的に取り扱うことである．原子と輻射のあいだのエネルギーの移行が，その過程で放出あるいは吸収される各光子のエネルギーにくらべて十分大きいため，移行の不連続性が無視される場合には，いつでもこの近似が成り立つ．それゆえこれは強度が高く振動数が低い（多くの光子が存在する）場合に適した近似である．特に，静電磁場またはラジオ波電場のなかにある原子の研究にはつごうがよい．このとき電磁場は，時間的に変化することがあるにしても，与えられた外部の場とみなされ，問題は与えられた外部の場のなかにある原子の挙動を研究することに帰着する．

第二の近似法は相互作用の項 H' を小さな摂動として取り扱うことである．これはスカラー場に関してすでに使った方法である．

§10 の説明は大きな変更をせずにここでも繰り返すことができる．摂動のないハミルトニアンは

$$H_0 \equiv H_{\text{ray.}} + H_{\text{at.}}$$

である．摂動法を適用するためには，H_0 が対角型になる表現を使わなければならない．場に対しては §27 で定めた平面波に適する表現をとる．この基底ベクトルは $H_{\text{at.}}$ にも，決まった運動量と偏りの方向をもつ光子の個数を表わす演算子 $N_{(\boldsymbol{k}\varpi)}$ にも共通な固有ベクトルである．

この表現における H' の行列要素は，この演算子を $a_{(k\varpi)}$ と $a^{\dagger}_{(k\varpi)}$ の関数として表わす式を使えば容易に求められる．(233) のなかの場 $\boldsymbol{A}$ に展開 (215) を代入すれば，

$$H_n^{(\mathrm{I})} = -\frac{e}{m}\sum_s\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2}(a_s(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{\epsilon})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + \text{エルミート共役}) \tag{236a}$$

$$H_n^{(\mathrm{II})} = -\frac{e}{2m}\sum_s\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2}(\mathrm{i}a_s(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\epsilon})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}} + \text{エルミート共役}) \tag{236b}$$

$$H''_n = \frac{e^2}{2m}\sum_s\sum_{s'}\frac{\pi}{\sqrt{kk'}L^3}((a_s a_{s'}(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\epsilon}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}} + \text{エルミート共役})$$
$$+ (a_s^{\dagger} a_{s'}(\boldsymbol{\epsilon}^*\cdot\boldsymbol{\epsilon}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{R}} + \text{エルミート共役})) \tag{237}$$

を得る [書き方を簡潔にするため，$s \equiv (k\varpi)$，$s' \equiv (k'\varpi')$ と置き，ベクトル $\boldsymbol{R}_n$，$\boldsymbol{P}_n$，$\boldsymbol{\sigma}_n$，$\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi)}$，$\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi')}$ をそれぞれ $\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{P}$，$\boldsymbol{\sigma}$，$\boldsymbol{\epsilon}$，$\boldsymbol{\epsilon}'$ で表わした]．これらの展開を定義式 (235) と (235′) に代入すれば，求める H' の式が導かれる．

相互作用 H' があることから生じる効果は，原子の準位をずらすとともに，基底準位を除くすべての準位を準安定にすることである（光子の質量は0であることを思い出そう）．この効果に関する議論は摂動法の枠のなかでなされる．明らかにこの議論は，スカラー場のときに出あったのと同じ困難をもたらす．このことは，相互作用の定数 e が小さい ($e^2 = 1/137$) という事実によらない．特に，H' が局所的な相互作用であること（式 (230) と (231) を参照）に結びついた《紫外発散》がある．この発散は適当な切断関数を導入することによって避けられる．すでに何回か繰り返して述べた理由により，m 程度の振動数のところに切り目を置くのが妥当である．このような切断の仕方に関して付け加えるべき条件についても，粒子の質量と電荷をくりこむ必要に結びついた困難についても，ここでは繰り返さない．実際には，準位のずれと準安定状態の性質（平均寿命，スペクトル線の幅，生成と崩壊のモード）に関する第II節の考察は，すべて本質的な変更なく輻射の場合に拡張される [28]．また，第II節で取り扱ったいくつかの衝突問題は，輻射の場合にも同じ方法で処理することができる．この章を終わるに当たって，輻射の量子論のごく簡単な応用を二つだけ述べることにしよう．すなわち，原子によって輻射が放出される確率の計算と，低い振動数の極限におけるコンプトン散乱の断面積の計算である．

---

[28] 輻射の場合が複雑になるのは，光子が質量0でスピン1の〈粒子〉であるという事実による．質量が0であるということから，《紫外発散》のほかに，《赤外発散》すなわち摂動展開の内のある種の項が低い振動数で発散するということが生じる．《赤外発散》は本来の意味における方法上の困難であり，方法を改良することによって避けうるものである．これに反して《紫外発散》は理論そのものがもつ困難であり，これに対する完全に満足すべき解決は現在のところ知られていない．

§ 31. 原子による光子の放出．双極子放出

エネルギー E_λ をもつ励起状態 $|\lambda\rangle$ の一つにある原子を考える．このような原子は E_λ より低いエネルギー $E_\alpha, E_\beta, \cdots$ をもつ状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots$ のいずれに対しても遷移を行なうことができ，この際始状態と終状態のエネルギーの差に等しいエネルギーをもつ光子を放出する．

これらの放射遷移の一つ

$$\lambda \longrightarrow \mu \boldsymbol{k} \boldsymbol{\epsilon}$$

を考える．μ は原子の終状態，$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{\epsilon}$ はそれぞれ放出された光子の運動量と偏光の方向である．このとき

$$k = E_\lambda - E_\mu \tag{238}$$

が成り立つ．単位時間あたりの遷移確率 $w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon}$ は，摂動計算を1次までとるとき，公式

$$w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon} = 2\pi\,|\langle\lambda|H'|\mu\,\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{\epsilon}\rangle|^2 (L^3 k^2/(2\pi)^3) \tag{239}$$

によって与えられる（§12 を参照）．

(235) により，H' は三つの項から成る．上の式の行列要素に対する第3項 H'' の寄与はいつでも 0 である [29]．初めの2項の行列要素は展開（236）を使って容易に求められ，

$$\langle\lambda|H^{(\mathrm{I})}|\mu\,\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{\epsilon}\rangle = -\frac{e}{m}\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2} F^{(\mathrm{I})} \tag{240a}$$

$$\langle\lambda|H^{(\mathrm{II})}|\mu\,\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{\epsilon}\rangle = \frac{\mathrm{i}e}{m}\left(\frac{2\pi}{kL^3}\right)^{1/2} F^{(\mathrm{II})}, \tag{240b}$$

ただし，

$$F^{(\mathrm{I})} \equiv \langle\lambda|\sum_n (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}|\mu\rangle \tag{241a}$$

$$F^{(\mathrm{II})} \equiv \langle\lambda|\frac{1}{2}\sum_n (\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}_n)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}|\mu\rangle. \tag{241b}$$

これらの式を（239）に代入すれば，結局つぎの公式を得る：

$$w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon} = \frac{e^2 k}{2\pi m^2}|F^{(\mathrm{I})} - \mathrm{i}F^{(\mathrm{II})}|^2, \tag{242}$$

ただし $F^{(\mathrm{I})}$ と $F^{(\mathrm{II})}$ は関係（241）によって定義された行列要素を表わす．

普通の原子的遷移では，遷移確率の大きさの程度に決定的な影響をおよぼすものとして，状態 $|\lambda\rangle$，$|\mu\rangle$ の角運動量 j_λ，j_μ および偶奇性 Π_λ，Π_μ がある．

---

(29) H'' の作用は現にある光子の個数を保つか，または2個だけ増減する．H'' は e に関して2次の大きさであるから，e に関して1次の摂動計算では省略してよいことに注意する．準位のずれの計算は2次であるから（§11 を参照），このときには H'' が無視できなくなる．H'' はまた光子の散乱においても重要である（§32 を参照）．

$j_\lambda = j_\mu = 0$ のとき，遷移確率は厳密に 0 であり，行列要素 $F^{(\mathrm{I})}$, $F^{(\mathrm{II})}$ はつねに 0 である（問題 9）．このことは角運動量 0 の光子が存在しないという事実と結びついている（§29 を参照）．

j_λ または j_μ が 0 と異なるときは，長波長近似を行なって遷移確率を評価することができる．R は原子の大きさ程度の長さとする．普通の原子的遷移では

$$k \lesssim e^2/R \simeq me^4,$$

したがって

$$kR \lesssim e^2 \ll 1$$

が成り立つ．それゆえ (241) のなかの指数関数をテイラー展開して，0 でない寄与を与える最初の項だけをとり，(241) を評価することができる．この項の大きさの程度は角運動量と偶奇性の選択規則によって本質的に定められる．ここでは選択規則に関する議論の詳細には立ち入らない[80]．すべての事情が等しいとき，遷移確率が最大になるのはいわゆる電気双極子遷移の場合，すなわち

$$\Delta j \equiv |j_\lambda - j_\mu| \leqslant 1, \qquad \Delta\Pi = \Pi_\lambda \Pi_\mu = -1 \qquad (j_\lambda + j_\mu = 0 \text{ を除く}) \tag{243}$$

の場合である．つづいて磁気双極子遷移 ($\Delta j \leqslant 1$, $\Delta\Pi = 1$, $j_\lambda + j_\mu \neq 0$)，電気 4 極子遷移 ($\Delta j \leqslant 2$, $\Delta\Pi = +1$, $j_\lambda + j_\mu \neq 0, 1$) の場合であるが，後者は電気双極子遷移より $(kR)^{-2}$ 倍も遅い．

電気双極子放出の条件 (243) が満たされているとする．このとき，

$$F^{(\mathrm{I})} \simeq \langle\lambda|\sum_n(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}_n)|\mu\rangle, \qquad F^{(\mathrm{II})} \simeq \frac{1}{2}\mathrm{i}\langle\lambda|\sum_n(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\sigma}_n)(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n)|\mu\rangle$$

と書くことができる．それゆえおおよそのところ $F^{(\mathrm{I})} \approx 1/R$, $F^{(\mathrm{II})} \approx k^2R$，すなわち

$$|F^{(\mathrm{II})}/F^{(\mathrm{I})}| \approx (kR)^2 \ll 1$$

が成り立つ．$F^{(\mathrm{II})}$ の寄与は $F^{(\mathrm{I})}$ の寄与に対してまったく無視できる．後者を計算するために便宜上電子の電気双極子モーメント

$$\boldsymbol{D} \equiv e\sum_n \boldsymbol{R}_n \tag{244}$$

を導入する［このベクトル演算子を第 13 章の §33 と第 17 章の §3 では $\boldsymbol{Q}^{(l)}$ で表わした

---

(80) 平面波による展開よりもむしろ多重極展開を使えば，事柄はいっそう自然な形で見られる．選択規則によって大部分の寄与は 0 となり，その他の寄与を評価するには，多重極の場 $\boldsymbol{\Theta}$ を kr のべき級数に展開して，最初の項だけをとればよい．$kr \ll 1$ のとき，

$$\boldsymbol{\Theta}^{(+)}_{kjm} \propto (kr)^{j-1}, \qquad \boldsymbol{\Theta}^{(-)}_{kjm} \propto (kr)^j$$

に注意する（式 (225) を参照）．この方法に関する完全な議論は，原子核の γ 放射遷移に関連して，J. Blatt と V. Weisskopf の前掲書（第 13 章脚注 (33)），第 12 章に見いだされよう．

(第17章 (35) を参照)].

関係

$$[\boldsymbol{D}, H_{\mathrm{at.}}] = \mathrm{i}e\sum_n \boldsymbol{P}_n/m$$

が成り立つから,

$$(\mathrm{i}e/m)\langle\lambda|\sum_n \boldsymbol{P}_n|\mu\rangle = \langle\lambda|(\boldsymbol{D}H_{\mathrm{at.}} - H_{\mathrm{at.}}\boldsymbol{D})|\mu\rangle$$
$$= (E_\mu - E_\lambda)\langle\lambda|\boldsymbol{D}|\mu\rangle = -k\langle\lambda|\boldsymbol{D}|\mu\rangle,$$

したがって

$$F^{(1)} = \frac{\mathrm{i}mk}{e}\langle\lambda|(\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{\epsilon})|\mu\rangle,$$

そして

$$w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon} = \frac{k^3}{2\pi}|\langle\lambda|(\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{\epsilon})|\mu\rangle|^2. \tag{245}$$

計算を進めるためには,始状態と終状態の《磁気量子数》m_λ, m_μ をはっきり書き,第13章の定義 (124) にしたがって縮小行列要素 $\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle$ を導入するとつごうがよい.ベクトル演算子 $\boldsymbol{D}$ の第 q 標準成分を $D_q(q=+,0,-)$ とすれば,ウィグナー=エッカルトの定理により,

$$\langle\lambda j_\lambda m_\lambda|D_q|\mu j_\mu m_\mu\rangle = (2j_\lambda+1)^{-1/2}\langle j_\mu 1 m_\mu q|j_\lambda m_\lambda\rangle\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle$$

を得る.偏光ベクトルの標準成分 (第13章,定義 (94)) を ε_q $(q=+,0,-)$ と書けば,$(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{D}) = \sum_q \varepsilon_q D_q$ であるから,結局

$$w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon} = [k^3|\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle|^2/2\pi] \times [|\sum_q \varepsilon_q\langle j_\mu 1 m_\mu q|j_\lambda m_\lambda\rangle|^2/(2j+1)] \tag{246}$$

が得られる.

原子の始状態に偏りがなく,終状態については任意の方向に対する遷移確率だけを知りたいときには,m_μ に関する和と m_λ に関する平均,すなわち

$$\langle w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon}\rangle \equiv \frac{1}{2j_\lambda+1}\sum_{m_\lambda m_\mu} w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon}$$

をとる必要がある.C.-G. 係数の対称関係と直交関係 (付録 C, (13c) と (14a) を参照) を使えば,この式の処理は容易になされ,

$$\langle w_{\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon}\rangle = \frac{k^3|\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle|^2}{6\pi(2j_\lambda+1)}$$

が得られる.予想することもできたように,上に得られた表示式は放出される光子の放出方向にも,またその偏りの方向にも無関係である.単位時間に対する遷移 $\lambda\to\mu$ の全確率をこれから導き出すには,二つの偏光状態について加え,放出角について積分する.言いかえれば,上の式に 8π を掛ければよい.すなわち

$$w_{\lambda\to\mu}^{(\mathrm{tot.})} = \frac{4k^3}{3(2j_\lambda+1)}|\langle\lambda\|\boldsymbol{D}\|\mu\rangle|^2. \tag{247}$$

§32. 低エネルギーにおけるコンプトン散乱．トムソンの公式

衝突問題の例として，第II節で取り扱った問題をもう一度とり上げる代りに——これらも同じ方法で解くことができるけれども——コンプトン散乱の最も簡単な問題，すなわち自由電子による光子の散乱の問題を考える [31].

衝突前の系の状態は与えられた運動量 $\boldsymbol{P}_i$ をもつ1電子と1光子からなる．光子の運動量と偏光方向をそれぞれ $\boldsymbol{k}_i$, $\boldsymbol{\epsilon}_i$ で表わす．この状態はあるケットベクトルで表わされるが，これを

$$|i\rangle \equiv |\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{k}_i\boldsymbol{\epsilon}_i\rangle$$

と書く．この始状態から終状態への散乱の断面積を計算したい．終状態における電子の運動量，光子の運動量と偏光方向をそれぞれ $\boldsymbol{P}_f$, $\boldsymbol{k}_f$, $\boldsymbol{\epsilon}_f$ とし，終状態を

$$|f\rangle \equiv |\boldsymbol{P}_f\boldsymbol{k}_f\boldsymbol{\epsilon}_f\rangle$$

と書く．この衝突において，エネルギーと運動量は保存される．

任意のエネルギーに対して断面積を計算するためには，電子を輻射と相互作用するディラック粒子として取り扱うことが必要であり，この相互作用は $-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$ である．この §32 では，低い振動数の極限においてこの問題を取り扱うだけにする [32].

始状態の電子は静止しており（$\boldsymbol{P}_i=0$），入射光子は十分軟かく，衝突の際電子に移されるエネルギーは電子の静止質量にくらべてごく小さいと仮定する．すなわち

$$k_i \ll m$$

（したがって $k_f \simeq k_i$, $P_f \approx k_f$）．このときは電子を非相対論近似で取り扱い，系のハミルトニアンをつぎのようにとることができる：

$$H = H_0 + H'.$$

ただし

$$H_0 = H_{\mathrm{ray.}} + \frac{\boldsymbol{P}^2}{2m}.$$

(235) により，H' は三つの項 $H^{(\mathrm{I})}, H^{(\mathrm{II})}, H''$ の和であり，これらはそれぞれ (236a)，(236b)，(237) によって定められる．

(31) スカラー場の場合には，自由粒子による場の〈粒子〉の散乱断面積は厳密に0である．

(32) 一般の場合の取り扱いも同じ方法にしたがってなされ（HEITLER，前掲書 (248頁の脚注 (2)) を参照），クライン＝仁科の公式が得られる．計算は長いけれども重大な困難はない．また，輻射の量子論の共変形式論を使えば，計算は非常に簡潔になる（JAUCH と RÖHRLICH，前掲書 (248頁の脚注 (2)) を参照）．

衝突の断面積を計算するために，衝突理論の公式を適用する．この点に関し §14 でなされた保留条件がいまの場合にも存続することは明らかである．われわれはこのことにたちもどらず，§14 のときと同じように，問題に現われる電子の質量 m が実験的に測られる質量である限り，衝突理論によって与えられる諸公式は正しいものであると認める．

ところで，衝突理論の形式論を単純に適用しようとすると別の困難，すなわち重心の変数を定義し，分離することができないという困難に出会う．しかしこれも見掛け上のものにすぎない．実際，重心運動の消去は衝突の非相対論的理論において第二義的な役割しか演じない．これがもたらす単純化は，系の全運動量が衝突の際保存されるという事実からくる．この消去をしないで衝突理論を定式化しなおすことができる．このとき運動量保存の法則は表面に現われる．

われわれが使おうとしているのはこの新しい定式化である．これによってもたらされる修正は，遷移の振幅 $T_{i\to f}$ の定義に関することだけである．われわれは T に対して形式的に同じ定義

$$T \equiv H' + H' \frac{1}{E - H + \mathrm{i}\varepsilon} H'$$

を採用する．T は並進によって不変であるから，行列要素 $\langle f|T|i\rangle$ は全運動量の保存を保証する δ 関数を因数として含む．$T_{i\to f}$ は関係

$$\langle f|T|i\rangle = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{P}_f + \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{k}_i) T_{i\to f} \tag{248}$$

によって定義する．ここに導入した因子 $(2\pi)^3$ は電子の平面波に対して採用した規格化

$$\langle \boldsymbol{P}|\boldsymbol{P}'\rangle = (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}')$$

を考慮して決めたものである．これだけのことを明確にした上で，衝突の断面積はやはり一般の公式 (116) によって与えられる．

$\langle f|T|i\rangle$ を計算するには，T を e のべき級数に展開し，最低次の項すなわち e^2 の項だけをとる．その結果は

$$\langle f|T|i\rangle = \langle f|H''|i\rangle + \langle f|(H^{(\mathrm{I})} + H^{(\mathrm{II})}) \frac{1}{E - H_0 + \mathrm{i}\varepsilon} (H^{(\mathrm{I})} + H^{(\mathrm{II})})|i\rangle + O(e^4). \tag{249}$$

(236a)，(236b) と (237) をすこし調べれば明らかなように，右辺の 2 項はいずれも積分

$$\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{P}_i + \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{P}_f - \boldsymbol{k}_f)\cdot\boldsymbol{R}} \mathrm{d}\boldsymbol{R} \equiv (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{P}_f + \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{k}_i)$$

を因数として含む．これが上に述べた運動量保存の項である．(237) からはまた，$k = (k_i k_f)^{1/2}$ と置くとき，

$$\langle f|H''|i\rangle = \frac{2\pi e^2}{mkL^3} (\boldsymbol{\epsilon}_f^* \cdot \boldsymbol{\epsilon}_i) \int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_i + \boldsymbol{P}_i - \boldsymbol{k}_f - \boldsymbol{P}_f)\cdot\boldsymbol{R}} \mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{250}$$

が導かれる．低い振動数の極限だけを考えているのであるから，1 に対して k/m の程度の項は無視し，簡単に

$$k_i \simeq k_f \simeq k$$

と書く．(249) の右辺の第 2 項に関しては，容易に示されるように，遷移振幅に対するこの項の寄与は第 1 項の寄与に k/m 程度の大きさを掛けたものである．それゆえこの項は無視する．結局，考えている近似の条件 ($e^2 \ll 1, k \ll m$) の下では，

$$T_{i\to f} = \frac{2\pi e^2}{mkL^3}(\epsilon_f^* \cdot \epsilon_i), \tag{251}$$

したがって散乱の断面積は

$$\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega} = 2\pi L^3 |T_{i\to f}|^2 (L^3 k^2/(2\pi)^3) = \frac{e^4}{m^2} |\epsilon_f^* \cdot \epsilon_i|^2 \tag{252}$$

となる（式 (116) を参照）．

偏りのない光子の k_f 方向に対する散乱断面積を得るには，始めの偏光がとりうる二つの状態についてこの式を平均し，終りの偏光がとりうる二つの状態についてこの式を加えなければならない．光子の偏向角を θ で表わす ($\cos\theta = (k_i \cdot k_f)/k^2$)．このとき

$$\left.\frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega}\right|_{\text{non pol.}} = \frac{1}{2}\sum_{\epsilon_i \epsilon_f} \frac{d\sigma_{i\to f}}{d\Omega} = \frac{1}{2}\frac{e^4}{m^2}(1+\cos^2\theta). \tag{253}$$

光子の散乱の全断面積 $\sigma_{\text{tot.}}$ はこの式から放出角に関する積分によって求められる．結果は

$$\sigma_{\text{tot.}} = \frac{8\pi}{3}\frac{e^4}{m^2}. \tag{254}$$

これらの結果はいずれも実験とよく一致する．

(252)，(253)，(254) は輻射の古典理論が与える式と同じものである [33]．特に全断面積に対してはトムソンの古典公式がもう一度得られる．二つの理論の結果がこのように一致することにより，コンプトン効果に関する古典理論の有効範囲と限界について第 1 章 §5 に述べたことが確かめられ，はっきりする．明らかに古典理論は輻射の〈粒子〉的性格をも，輻射と電子のあいだの運動量およびエネルギーの移行がとびとびの量子によって行なわれるということをも考慮に入れることができない．しかしそれは単位時間と単位入射流束に対して電子に移される運動量の平均値（式 (254)）や，散乱された輻射の方向分布と偏光（式 (252)）のほか，ドップラー効果を考慮に入れるときには，散乱された輻射

[33] 定数 $\hbar$ はここに現われない．これらはいずれも電子の古典半径 $r_0 \equiv e^2/mc^2$ の何倍かになっている．たとえば，(252) はまた $r_0^2 \cos^2\alpha$ とも書かれる．ただし α は始めの偏光方向と終りの偏光方向とのあいだの角を表わす（偏光は直線偏光であるとする）．

の波長のずれ（第1章 (5)，(6)）をも正確に予想することができる．

二つの理論の一致が完全に実現するのは，低い振動数の極限の場合に限られる．このときには輻射の波長 $1/k$ が十分大きく，散乱の現象は電子の内部構造に事実上依存しない．電子も量子的な対象であるから，その大きさは $1/m$ 程度であり，その構造の効果 (34) は比 k/m の程度である．非相対論的極限において，それは (249) の第2項によって与えられる．入射エネルギーを増すにつれて，電子の量子的性質がだんだん明瞭になり，古典理論による予想からのずれがだんだんはっきりと観測される．

演習と問題

1. $\Phi(\boldsymbol{r})$ が第I節の実スカラー場を表わすとき，一つの有限な領域におけるこのオブザーバブルの積分を測ろうとする．もっと一般には，積分

$$\hat{\Phi} \equiv \int \Phi(\boldsymbol{r}) P(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

を考える．$P(\boldsymbol{r})$ は与えられた実の負でない関数で，これを全空間にわたって積分すれば1に等しくなるものとする．ここで

$$\chi(\boldsymbol{\kappa}) \equiv \int \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{r}) P(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad (\chi(0) = 1)$$

と置く．真空状態における $\hat{\Phi}$ の統計的分布はガウス分布であって，

$$(\Delta\hat{\Phi})^2 = \int \frac{|\chi(\boldsymbol{\kappa})|^2}{16\pi^3(\mu^2 + \kappa^2)^{1/2}} \mathrm{d}\boldsymbol{\kappa}$$

であることを示せ．特に，重み関数 $P(\boldsymbol{r})$ が1次元の大きさ a 程度の領域だけで目立った値をとり，$\mu a \ll 1$ ならば，$\Delta\hat{\Phi} \approx 1/a$ が成り立つ．

同じ問題を電磁場の場合に考え，真空状態において

$$\Delta\mathcal{E}_\perp \approx \Delta\mathcal{H} \approx 1/a^2$$

であることを示せ．

2. §11 で定義した補正 δM は，(76) の右辺に現われた式によって2次まで与えられることを示せ．

3. §14 で定義した弾性散乱の問題を考える．標的には偏りがないと仮定し，散乱角を θ で表わす．すなわち $\cos\theta = (\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{k}_f)/k^2$．2次のボルン近似では，長波長近似 $(k\langle R\rangle \ll 1)$ の極限において，弾性的に散乱される〈粒子〉の方向分布は $\cos^2\theta$ に比例し $k\to 0$ の極限において断面積は0に近づくことを示せ（この性質はスカラー相互作用に特有のものである）．

---

(34) 古典理論においては，構造の効果は ke^2/m，すなわち古典半径の輻射波長に対する比の程度である．電子の古典理論の現状では，これを計算するための曖昧でない方法は存在しない．

4.　§15の共鳴散乱の問題を考え，そのときの記号をそのまま使う．原子系の始状態 $|\alpha\rangle$ は角運動量0をもち，共鳴状態 $|\lambda\rangle$ は角運動量 l をもつとする．$A^{(\mathrm{pot.})}$ の寄与を無視すれば，弾性散乱 $\boldsymbol{k}_i \to \boldsymbol{k}_f$ に関する遷移振幅 T は公式

$$T = \frac{\pi}{\omega L^3}\frac{2l+1}{k}P_l(\cos\theta)\frac{\Gamma_{\lambda\to\alpha}}{(E-E_\lambda-\delta E_\lambda)+\mathrm{i}\Gamma_\lambda/2}$$

によって与えられることを示せ．ただし，θ は散乱角，$\Gamma_{\lambda\to\alpha}$ は輻射放出遷移 $\lambda\to\alpha$ の確率（式(82)を参照）を表わす．またその結果，弾性散乱の断面積 $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el.}}/\mathrm{d}\Omega$ は公式

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{el.}}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{(2l+1)^2}{k^2}P_l^2(\cos\theta)\frac{\Gamma_{\lambda\to\alpha}^2}{4(E-E_\lambda-\delta E_\lambda)^2+\Gamma_\lambda^2}$$

によって与えられることを示せ．これら二つの式は，中心力ポテンシャルのなかにある1粒子の共鳴散乱の場合に得られた式（第10章(64)と(65)）の簡単な一般化であることを示せ．また，第10章§15と§16の議論と計算は，共鳴と準安定状態の概念に関してそのまま繰り返されることを示せ．

5.　$A_j(\boldsymbol{r})$ と $\mathcal{E}_i(\boldsymbol{r}')$ がそれぞれ（輻射ゲージによる）ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ の第 j 成分と横の電場 $\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp$ の第 i 成分を表わすとき，つぎの交換関係を証明せよ：

$$[\mathcal{E}_i(\boldsymbol{r}), A_j(\boldsymbol{r}')] = \mathrm{i}\theta_{ij}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

ただし

$$\theta_{ij}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \equiv \delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') - \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x'_j}\left(\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)$$

（$\theta_{ij}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ は横のベクトル場がつくる部分空間への射影子である）．

6.　輻射の全運動量を与える式(220)を証明せよ．

7.　輻射の角運動量のスピン部分 $\boldsymbol{G}^{(s)}$ は公式

$$\boldsymbol{G}^{(s)} = -\mathrm{i}\sum_{\boldsymbol{k}\varpi\varpi'} a^\dagger_{(\boldsymbol{k}\varpi)}a_{(\boldsymbol{k}\varpi')}(\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi)*}\times\boldsymbol{\epsilon}^{(\varpi')})$$

（§27の記号）を満たすことを証明せよ．特に，運動量 $\boldsymbol{k}$ の光子で右回り円偏光をもつものと左回り円偏光をもつもの（定義(222)）の個数をそれぞれ $N_{\boldsymbol{k}+}$ と $N_{\boldsymbol{k}-}$ で表わすとき

$$\boldsymbol{G}^{(s)} = \sum_{\boldsymbol{k}}(N_{\boldsymbol{k}+}-N_{\boldsymbol{k}-})\boldsymbol{k}/k$$

が成り立つことを証明せよ．

8.　関係(223)と(224)を証明せよ．

9.　行列要素を具体的に表わす式(241a, b)を使って，つぎのことを示せ：始状態と終状態のスピンが両方とも0ならば，光子の放出される確率は厳密に0である（$0\to0$ 選択規則）．

［注意；平面波による展開の代りに多重極展開を使うと，この性質は自明になる］．

10.　水素原子における輻射放出遷移 $2p\to1s$ の単位時間あたりの確率を計算せよ（$w_{2p\to1s} = 6.25\times10^8\,\mathrm{sec}^{-1}$ が得られる）．

11.　長波長近似において，磁気双極子輻射放出遷移 $\lambda\to\mu\boldsymbol{k}\epsilon$（§30の記号）の確率は

公式

$$w_{\lambda\to\mu k\epsilon}=\frac{k}{2\pi}|\langle\lambda|[\boldsymbol{M}\cdot(\boldsymbol{\epsilon}\times\boldsymbol{k})]|\mu\rangle|^2$$

によって与えられることを示せ（式（245）を参照）．ただし $\boldsymbol{M}$ は遷移を行なう原子系の全磁気モーメント

$$\boldsymbol{M}=\frac{e}{2m}\sum_i(\boldsymbol{l}_i+2\boldsymbol{s}_i)$$

である（注意；$\varDelta\Pi=+1$ で $j_\lambda+j_\mu\leqslant 1$ のとき，この公式は輻射を伴う遷移の確率を正確に与える；$j_\lambda+j_\mu\geqslant 2$ ならば，電気4極子の寄与が0でなくなり，一般にはこれを無視することができない）．

このことから，磁気双極子遷移の全確率は公式

$$w_{\lambda\to\mu}^{(\mathrm{tot.})}=\frac{4k^3}{3(2j_\lambda+1)}|\langle\lambda\|\boldsymbol{M}\|\mu\rangle|^2$$

によって与えられることを導け（式（247）を参照）．水素原子の遷移 $2s\to 1s$ の場合，非相対論近似では（すなわち，シュレーディンガー理論の波動関数を使うならば），この量は0であることを示せ．

12. 水素原子の基底状態について光電効果の断面積を計算せよ．ただし $me^4\ll k\ll m$ ($m\equiv$ 電子の質量，$k\equiv$ 入射光子の運動量，$\hbar=c=1$) と仮定する．その結果，光電子に移されるエネルギーは十分大きく，その終状態は平面波と同一視されるが，その速度は十分小さく，これを非相対論粒子として取り扱うことができる．磁気相互作用（項 $H^{(\mathrm{II})}$）の寄与は無視できるから，

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=4\sqrt{2}\,e^8\left(\frac{m}{k}\right)^{7/2}\times\frac{e^4}{m^2}\frac{\cos^2\varphi}{(1-v\cos\theta)^4}$$

となる．ただし φ と θ はそれぞれ放出方向が偏光方向（直線偏光と仮定する）および入射光子の運動量方向に対してつくる角を表わす．この公式において $v=0$ とすれば，この効果に関する半古典理論の諸結果（第17章，問題2を参照）がもう一度見いだされる．

訳者の付録

第20章 §10で解説されたディラック行列の性質を一つ補っておく．これは195頁の訳注で用いたものである．

4個の 4×4 型行列 γ^0, γ^1, γ^2, γ^3 から，192頁の20・1表にあげられた16個の行列 γ^A が生じる．これらを $\Gamma^i(i=1,2,\cdots,16)$ で表わそう．Γ^i は互いに交換または反交換するから，関係

$$\Gamma^i\Gamma^j=\varepsilon^{i,j}\Gamma^j\Gamma^i$$

によって，16×16 型の行列

$$(\varepsilon^{i,j})=\begin{pmatrix}\varepsilon^{1,1} & \cdots & \varepsilon^{1,16}\\ & \cdots\cdots\cdots\cdots & \\ \varepsilon^{16,1} & \cdots & \varepsilon^{16,16}\end{pmatrix}$$

が定められる．当然のことながら $\varepsilon^{i,j}=\varepsilon^{j,i}=\pm1$ である．ここで行列 $(\varepsilon^{i,j})$ は正則であることを証明する．

まず，γ^0, γ^1, γ^2, γ^3 との交換関係を考慮して，16個の γ^A をつぎの表のように整理する：

		γ^0	γ^1	γ^2	γ^3			γ^0	γ^1	γ^2	γ^3
Γ^1	I	+	+	+	+	Γ^9	$\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	−	+	+	+
Γ^2	$\gamma^0\gamma^1\gamma^2$	+	+	+	−	Γ^{10}	$\gamma^3\gamma^0$	−	+	+	−
Γ^3	$\gamma^0\gamma^3\gamma^1$	+	+	−	+	Γ^{11}	$\gamma^2\gamma^0$	−	+	−	+
Γ^4	$\gamma^2\gamma^3$	+	+	−	−	Γ^{12}	γ^1	−	+	−	−
Γ^5	$\gamma^0\gamma^2\gamma^3$	+	−	+	+	Γ^{13}	$\gamma^1\gamma^0$	−	−	+	+
Γ^6	$\gamma^3\gamma^1$	+	−	+	−	Γ^{14}	γ^2	−	−	+	−
Γ^7	$\gamma^1\gamma^2$	+	−	−	+	Γ^{15}	γ^3	−	−	−	+
Γ^8	γ^0	+	−	−	−	Γ^{16}	$\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	−	−	−	−

ここで + は交換を，− は反交換を示す．たとえば $\Gamma^2=\gamma^0\gamma^1\gamma^2$ は γ^0, γ^1, γ^2 とそれぞれ交換し，γ^3 と反交換する．

Γ^i の交換関係は行列 $(\varepsilon^{i,j})$ の第 i 行

$$a^i\equiv(\varepsilon^{i,1}\,\varepsilon^{i,2}\,\cdots\,\varepsilon^{i,16})$$

で表わされる．たとえば，

$$\boldsymbol{a}^1=(1\ 1\ \cdots\ 1),\qquad \boldsymbol{a}^8=(\overbrace{1\ \cdots\ 1}^{8\text{個}}\ \overbrace{-1\ \cdots\ -1}^{8\text{個}}).$$

これから $\boldsymbol{b}^1=(\boldsymbol{a}^1+\boldsymbol{a}^8)/2$, $\bar{\boldsymbol{b}}^8=(\boldsymbol{a}^1-\boldsymbol{a}^8)/2$ をつくれば，

$$\boldsymbol{b}^1=(1\ \cdots\ 1\ 0\ \cdots\ 0),\qquad \bar{\boldsymbol{b}}^8=(0\ \cdots\ 0\ 1\ \cdots\ 1)$$

を得る．

一般に，$\gamma^0\Gamma^i=\pm\Gamma^j$ (Γ^i は γ^0 を含まない) となるような i と j については，

$$\boldsymbol{a}^j=(\varepsilon^{i,1}\ \cdots\ \varepsilon^{i,8}\ -\varepsilon^{i,9}\ \cdots\ -\varepsilon^{i,16})$$

となるから，$\boldsymbol{b}^i=(\boldsymbol{a}^i+\boldsymbol{a}^j)/2$, $\bar{\boldsymbol{b}}^j=(\boldsymbol{a}^i-\boldsymbol{a}^j)/2$ と置けば，

$$\boldsymbol{b}^i=(\varepsilon^{i,1}\ \cdots\ \varepsilon^{i,8}\ 0\ \cdots\ 0),\qquad \bar{\boldsymbol{b}}^j=(0\ \cdots\ 0\ \varepsilon^{i,9}\ \cdots\ \varepsilon^{i,16})$$

となる．こうして16個のベクトル

$$\begin{array}{ccccccccc}(\boldsymbol{b}^i) & \boldsymbol{b}^1 & \boldsymbol{b}^4 & \boldsymbol{b}^6 & \boldsymbol{b}^7 & \boldsymbol{b}^9 & \boldsymbol{b}^{12} & \boldsymbol{b}^{14} & \boldsymbol{b}^{15}\\ (\bar{\boldsymbol{b}}^j) & \bar{\boldsymbol{b}}^8 & \bar{\boldsymbol{b}}^5 & \bar{\boldsymbol{b}}^3 & \bar{\boldsymbol{b}}^2 & \bar{\boldsymbol{b}}^{16} & \bar{\boldsymbol{b}}^{13} & \bar{\boldsymbol{b}}^{11} & \bar{\boldsymbol{b}}^{10}\end{array}$$

が $\boldsymbol{a}^i$ の線形結合としてつくられる．$\boldsymbol{b}$ 型のベクトルは後半8個の成分が消え，$\bar{\boldsymbol{b}}$ 型は前半8個の成分が消える．つぎに8個の $\boldsymbol{b}$ 型ベクトルが線形独立であることを証明する ($\bar{\boldsymbol{b}}$ 型の8個についても同じことが確かめられる)．これらはすべて8元ベクトルとみなしてよい．特に，

$$\boldsymbol{b}^1=(1\ 1\ \cdots\ 1),\qquad \boldsymbol{b}^{12}=(1\ 1\ 1\ 1\ -1\ -1\ -1\ -1).$$

これから，

$$\boldsymbol{c}^1=(\boldsymbol{b}^1+\boldsymbol{b}^{12})/2=(1\ 1\ 1\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0)$$
$$\bar{\boldsymbol{c}}^{12}=(\boldsymbol{b}^1-\boldsymbol{b}^{12})/2=(0\ 0\ 0\ 0\ 1\ 1\ 1\ 1).$$

前と同じように，$\gamma^1\Gamma^i=\pm\Gamma^j$ (Γ^i は γ^0, γ^1 を含まない) となるような組 (i,j) から，

$$\boldsymbol{c}^i=(\boldsymbol{b}^i+\boldsymbol{b}^j)/2,\qquad \bar{\boldsymbol{c}}^j=(\boldsymbol{b}^i-\boldsymbol{b}^j)/2$$

をつくれば，

$$\begin{array}{ccccc}(\boldsymbol{c}^i) & \boldsymbol{c}^1 & \boldsymbol{c}^4 & \boldsymbol{c}^{14} & \boldsymbol{c}^{15}\\ (\bar{\boldsymbol{c}}^j) & \bar{\boldsymbol{c}}^{12} & \bar{\boldsymbol{c}}^9 & \bar{\boldsymbol{c}}^7 & \bar{\boldsymbol{c}}^6\end{array}$$

が $\boldsymbol{b}^i$ の線形結合として得られる．$\boldsymbol{c}$ 型のベクトルは後半4個の成分が消え，$\bar{\boldsymbol{c}}$ 型は前半4個の成分が消える．4個の $\boldsymbol{c}$ 型ベクトルを4元ベクトルと考え，これらが線形独立であることを証明する ($\bar{\boldsymbol{c}}$ 型についても同様である)．$\gamma^2\Gamma^i=\pm\Gamma^j$ (Γ^i は γ^0, γ^1, γ^2 を含まない) となるような組 (i,j) をとり，

$$\boldsymbol{d}^i = (\boldsymbol{c}^i + \boldsymbol{c}^j)/2, \qquad \bar{\boldsymbol{d}}^j = (\boldsymbol{c}^i - \boldsymbol{c}^j)/2$$

をつくれば,

$$\begin{array}{ccc} (\boldsymbol{d}^i) & \boldsymbol{d}^1 & \boldsymbol{d}^{15} \\ (\bar{\boldsymbol{d}}^j) & \bar{\boldsymbol{d}}^{14} & \bar{\boldsymbol{d}}^4 \end{array}$$

となり, $\boldsymbol{d}$ 型の後半, $\bar{\boldsymbol{d}}$ 型の前半成分が消える. $\boldsymbol{d}$ 型を2元ベクトルとみなせば,

$$\boldsymbol{d}^1 = (1\ 1), \qquad \boldsymbol{d}^{15} = (1\ 0)$$

となり明らかに線形独立である. $\bar{\boldsymbol{d}}$ 型についても同じことが言える. (証明終)

総索引

サ 行

タ 行

訳者紹介

小出昭一郎（こいで しょういちろう）

1950年東京大学理学部物理学科卒業，1957～8年英国ブリストル大学へ留学，1962～4年スイスのジュネーブ大学招聘教授

〔現在〕 東京大学教養学部教授，理学博士，物性理論専攻

〔主要著訳書〕 「物理数学Ｉ」（朝倉書店），「量子論」，「量子力学Ｉ，II」，「物理学」（裳華房），ハイゼンベルク「量子論の物理的基礎」（共訳，みすず書房），スレーター「現代物理学」（共訳，好学社），ヤンマー「量子力学史 1,2」（東京図書）

田村二郎（たむら じろう）

1943年東京帝国大学理学部数学科卒業，名古屋帝国大学大学院特別研究生，第一高等学校教授などを経て，1961年東京大学教養学部教授，1968年東京大学教養学部長，翌年退官

〔現在〕 理学博士，解析関数論専攻

〔主要著訳書〕 「基礎課程微分積分学」（共著，裳華房），「解析関数」（裳華房），「微積分読本」（岩波書店），ワイル「リーマン面」（岩波書店）

メシア量子力学 3

1972年２月15日　第１刷発行　　Printed in Japan
1977年６月10日　第５刷発行

著　者　A.　メ　シ　ア
訳　者　小　出　昭　一　郎
　　　　田　村　二　郎

検印省略

発行所　東京図書株式会社
東京都文京区水道２－５　カキビル
振替 東京4-13803 電話(814)7818-9

3042-3022-5160